

# FDPS ユーザチュートリアル

谷川衝, 行方大輔, 細野七月, 岩澤全規, 似鳥啓吾, 村主崇行, 野村昂太郎, and  
牧野淳一郎

理化学研究所 計算科学研究センター 粒子系シミュレータ研究チーム

## 0 目次

1 变更記録	7
2 概要	9
3 入門：サンプルコードを動かしてみよう	10
3.1 動作環境	10
3.2 必要なソフトウェア	10
3.2.1 標準機能	10
3.2.1.1 逐次処理	10
3.2.1.2 並列処理	10
3.2.1.2.1 OpenMP	11
3.2.1.2.2 MPI	11
3.2.1.2.3 MPI+OpenMP	11
3.2.2 拡張機能	11
3.2.2.1 Particle Mesh	11
3.3 インストール	11
3.3.1 取得方法	12
3.3.1.1 最新バージョン	12
3.3.1.2 過去のバージョン	12
3.3.2 インストール方法	12
3.4 サンプルコードの使用方法	13
3.4.1 重力 $N$ 体シミュレーションコード	13
3.4.1.1 概要	13
3.4.1.2 ディレクトリ移動	13
3.4.1.3 Makefile の編集	13

---

3.4.1.4	make の実行	14
3.4.1.5	実行	14
3.4.1.6	結果の解析	15
3.4.1.7	x86 版 Phantom-GRAPE を使う場合	15
3.4.1.8	PIKG を使う場合	17
3.4.1.9	NVIDIA の GPU を使う場合	17
3.4.2	SPH シミュレーションコード	17
3.4.2.1	概要	18
3.4.2.2	ディレクトリ移動	18
3.4.2.3	Makefile の編集	18
3.4.2.4	make の実行	18
3.4.2.5	実行	18
3.4.2.6	結果の解析	19
4	サンプルコードの解説	20
4.1	N 体シミュレーションコード	20
4.1.1	ソースファイルの場所と構成	20
4.1.2	ユーザー定義型・ユーザ定義関数	20
4.1.2.1	FullParticle 型	20
4.1.2.2	相互作用関数 calcForceEpEp	21
4.1.3	プログラム本体	22
4.1.3.1	ヘッダーファイルのインクルード	22
4.1.3.2	開始、終了	23
4.1.3.3	オブジェクトの生成・初期化	23
4.1.3.3.1	オブジェクトの生成	23
4.1.3.3.2	領域情報オブジェクトの初期化	23
4.1.3.3.3	粒子群オブジェクトの初期化	24
4.1.3.3.4	ツリーオブジェクトの初期化	24
4.1.3.4	ループ	24
4.1.3.4.1	領域分割の実行	24
4.1.3.4.2	粒子交換の実行	24
4.1.3.4.3	相互作用計算の実行	25
4.1.3.4.4	時間積分	25
4.1.4	ログファイル	25
4.2	固定長 SPH シミュレーションコード	26
4.2.1	ソースファイルの場所と構成	26
4.2.2	ユーザー定義型・ユーザ定義関数	26
4.2.2.1	FullParticle 型	26
4.2.2.2	EssentialParticleI 型	27
4.2.2.3	Force 型	28
4.2.2.4	相互作用関数 calcForceEpEp	29

---

4.2.3 プログラム本体 . . . . .	30
4.2.3.1 ヘッダーファイルのインクルード . . . . .	30
4.2.3.2 開始、終了 . . . . .	31
4.2.3.3 オブジェクトの生成・初期化 . . . . .	31
4.2.3.3.1 オブジェクトの生成 . . . . .	31
4.2.3.3.2 領域情報オブジェクトの初期化 . . . . .	31
4.2.3.3.3 粒子群オブジェクトの初期化 . . . . .	32
4.2.3.3.4 ツリーオブジェクトの初期化 . . . . .	32
4.2.3.4 ループ . . . . .	32
4.2.3.4.1 領域分割の実行 . . . . .	32
4.2.3.4.2 粒子交換の実行 . . . . .	32
4.2.3.4.3 相互作用計算の実行 . . . . .	32
4.2.4 コンパイル . . . . .	33
4.2.5 実行 . . . . .	33
4.2.6 ログファイル . . . . .	33
4.2.7 可視化 . . . . .	33
<b>5 サンプルコード</b> . . . . .	<b>34</b>
5.1 <i>N</i> 体シミュレーション . . . . .	34
5.2 固定長 SPH シミュレーション . . . . .	44
<b>6 拡張機能の解説</b> . . . . .	<b>55</b>
6.1 P <sup>3</sup> M コード . . . . .	55
6.1.1 サンプルコードの場所と作業ディレクトリ . . . . .	55
6.1.2 ユーザー定義型 . . . . .	55
6.1.2.1 FullParticle 型 . . . . .	55
6.1.2.2 EssentialParticleI 型 . . . . .	56
6.1.2.3 Force 型 . . . . .	57
6.1.2.4 相互作用関数 calcForceEpEp . . . . .	58
6.1.2.5 相互作用関数 calcForceEpSp . . . . .	59
6.1.3 プログラム本体 . . . . .	60
6.1.4 ヘッダーファイルのインクルード . . . . .	60
6.1.4.1 開始、終了 . . . . .	61
6.1.4.2 オブジェクトの生成と初期化 . . . . .	61
6.1.4.2.1 オブジェクトの生成 . . . . .	61
6.1.4.2.2 オブジェクトの初期化 . . . . .	62
6.1.4.3 粒子分布の生成 . . . . .	63
6.1.4.3.1 領域分割の実行 . . . . .	64
6.1.4.3.2 粒子交換の実行 . . . . .	64
6.1.4.4 相互作用計算の実行 . . . . .	64
6.1.4.5 エネルギー相対誤差の計算 . . . . .	66

---

6.1.5	コンパイル	66
6.1.6	実行	66
6.1.7	結果の確認	66
6.2	TreePM コード	68
6.2.1	サンプルコードの場所と作業ディレクトリ	68
6.2.2	ヘッダファイルのインクルード	68
6.2.3	ユーザー定義クラス	69
6.2.3.1	FullParticle 型	69
6.2.3.2	EssentialParticleI 型	73
6.2.3.3	EssentialParticleJ 型	74
6.2.3.4	Force 型	75
6.2.3.5	calcForceEpEp 型	75
6.2.4	プログラム本体	76
6.2.4.1	開始、終了	77
6.2.4.2	オブジェクトの生成と初期化	77
6.2.4.2.1	オブジェクトの生成	77
6.2.4.2.2	オブジェクトの初期化	78
6.2.4.3	初期条件の設定	78
6.2.4.3.1	領域分割の実行	79
6.2.4.3.2	粒子交換の実行	79
6.2.4.4	相互作用計算の実行	79
6.2.4.5	時間積分ループ	80
6.2.5	コンパイル	80
6.2.6	実行	80
6.2.7	結果の確認	80
6.3	PM <sup>3</sup> の精度確認プログラム	81
6.3.1	PM <sup>3</sup> の概要	81
6.3.1.1	Multipole Moment, Local Expansion によるポテンシャル計算	82
6.3.1.2	PM <sup>3</sup> での計算手順	82
6.3.1.3	FDPS を用いた PM <sup>3</sup> の計算	83
6.3.2	サンプルコードの場所	84
6.3.3	ヘッダファイルのインクルード	84
6.3.4	ユーザー定義クラス	84
6.3.4.1	FullParticle 型	84
6.3.4.2	EssentialParticle 型	85
6.3.4.3	Force 型	85
6.3.5	プログラム本体	87
6.3.6	ヘッダファイルのインクルード	87
6.3.6.1	TreeForForce オブジェクトの生成、初期化	87
6.3.6.2	Tree 法による力の計算	87

---

6.3.6.3	PM <sup>3</sup> オブジェクトの生成，初期化	88
6.3.6.4	PM <sup>3</sup> による力の計算	88
6.3.7	コンパイル方法，実行方法	88
6.3.8	結果の確認	89
6.4	PM <sup>3</sup> を用いた宇宙論の計算	90
6.4.1	サンプルコードの場所と作業ディレクトリ	90
6.4.2	ヘッダファイルのインクルード	90
6.4.3	ユーザー定義クラス	90
6.4.3.1	FullParticle 型	91
6.4.3.2	EssentialParticleI 型	94
6.4.3.3	EssentialParticleJ 型	94
6.4.3.4	Force 型	95
6.4.3.5	相互作用関数	95
6.4.4	プログラム本体	97
6.4.4.1	開始、終了	97
6.4.4.2	オブジェクトの生成と初期化	98
6.4.4.2.1	オブジェクトの生成	98
6.4.4.2.2	オブジェクトの初期化	98
6.4.4.3	初期条件の設定	99
6.4.4.3.1	領域分割の実行	99
6.4.4.3.2	粒子交換の実行	99
6.4.4.4	相互作用計算の実行	100
6.4.4.5	時間積分ループ	100
6.4.5	コンパイル	100
6.4.6	実行	100
6.4.7	結果の確認	101
7	より実用的なアプリケーションの解説	103
7.1	N 体/SPH コード	103
7.1.1	コードの使用方法	103
7.1.1.1	ディレクトリ移動	104
7.1.1.2	サンプルコードのファイル構成	104
7.1.1.3	Makefile の編集	104
7.1.1.4	MAGI を使った粒子データの生成	107
7.1.1.5	make の実行	108
7.1.1.6	実行	108
7.1.1.7	結果の解析	108
7.1.2	Springel の方法	109
7.1.3	ユーザー定義型	111
7.1.3.1	FullParticle 型	111
7.1.3.2	EssentialParticle 型	114

---

7.1.3.3	Force型	116
7.1.4	相互作用関数	117
7.1.4.1	重力計算	117
7.1.4.2	密度計算	119
7.1.4.3	圧力勾配加速度計算	122
7.1.5	プログラム本体	123
7.1.5.1	ヘッダファイルのインクルード	124
7.1.5.2	開始、終了	124
7.1.5.3	オブジェクトの生成と初期化	124
7.1.5.3.1	粒子群オブジェクトの生成と初期化	125
7.1.5.3.2	領域情報オブジェクトの生成と初期化	125
7.1.5.3.3	ツリーオブジェクトの生成と初期化	125
7.1.5.4	初期条件の設定	126
7.1.5.5	領域分割の実行	126
7.1.5.6	粒子交換の実行	127
7.1.5.7	相互作用計算の実行	127
7.1.5.8	時間積分ループ	129
8	ユーザーサポート	130
8.1	コンパイルできない場合	130
8.2	コードがうまく動かない場合	130
8.3	その他	130
9	ライセンス	131

# 1 変更記録

- 2015/01/25
  - 作成
- 2015/03/17
  - バージョン 1.0 リリース
- 2015/03/18
  - Particle Mesh クラス関連のライセンス事項を修正。
- 2015/03/30
  - N 体コードのログを修正
- 2015/03/31
  - サンプルの N 体コードのエネルギー計算の位置を修正
- 2015/12/01
  - GPU を使用する場合についての説明を追加 (セクション [3.4.1.9](#))
- 2018/07/11
  - 第 [3](#) 節の以下の記述を修正・改善
    - \* 動作確認済みコンパイラを更新 (FDPS バージョン 4.1a で確認)
    - \* SPH サンプルコードの出力ファイルの拡張子の誤植
  - 第 [4](#) 節の以下の記述を修正・改善
    - \* 領域情報クラスの initialize メソッドの仕様書での節番号に誤植 (第 [3.4.1](#) 節)
    - \* チュートリアルの記述と実際のコードで calcForceAllAndWriteBack() の引数に不一致 (第 [3.4.1](#) 節)
  - 第 [6](#) 節の以下の記述を修正・改善
    - \* PP パート部分の記述とソースコードに不一致 (第 [6.1](#) 節)
    - \* ファイル構成の説明が、実際のサンプルコードと一致していない (第 [6.2](#) 節)
    - \* チュートリアルの記述と実際のコードで decomposeDomainAll の引数に不一致 (第 [6.2](#) 節)
- 2018/8/18
  - N 体/SPH サンプルコードの解説を追加 (第 [7.1](#) 節)

- 2019/7/19
  - $N$  体/SPH サンプルコードの記述を改訂 (第 7.1 節)
- 2020/08/06
  - PIKG の利用法を追加 (第 3.4.1.8 節)
- 2020/08/28
  - TreePM コード (第 6.2 節) 及び  $N$  体/SPH コード (第 7.1 節) で使用可能な初期条件ファイルの配布先情報を修正
- 2020/09/02
  - TreeForForce クラスの `initialize` の第一引数の説明に誤解を招く表現があったため修正。サンプルコードも合わせて修正。
- 2023/7/18
  - 必要なソフトウェアをアップデート。Ruby を追加。gcc を 8.x 以降に変更
- 2025/09/03
  - PM<sup>3</sup> に関する節 (第 6.3 , 6.4 節) を追加 .

## 2 概要

本節では、Framework for Developing Particle Simulator (FDPS) の概要について述べる。FDPS は粒子シミュレーションのコード開発を支援するフレームワークである。FDPS が行うのは、計算コストの最も大きな粒子間相互作用の計算と、粒子間相互作用の計算のコストを負荷分散するための処理である。これらはマルチプロセス、マルチスレッドで並列に処理することができる。比較的計算コストが小さく、並列処理を必要としない処理（粒子の軌道計算など）はユーザーが行う。

FDPS が対応している座標系は、2 次元直交座標系と 3 次元直交座標系である。また、境界条件としては、開放境界条件と周期境界条件に対応している。周期境界条件の場合、 $x$ 、 $y$ 、 $z$  軸方向の任意の組み合わせの周期境界条件を課すことができる。

ユーザーは粒子間相互作用の形を定義する必要がある。定義できる粒子間相互作用の形には様々なものがある。粒子間相互作用の形を大きく分けると 2 種類あり、1 つは長距離力、もう 1 つは短距離力である。この 2 つの力は、遠くの複数の粒子からの作用を 1 つの超粒子からの作用にまとめるか（長距離力）、まとめないか（短距離力）という基準でもって分類される。

長距離力には、小分類があり、無限遠に存在する粒子からの力も計算するカットオフなし長距離力と、ある距離以上離れた粒子からの力は計算しないカットオフあり長距離力がある。前者は開境界条件下における重力やクーロン力に対して、後者は周期境界条件下の重力やクーロン力に使うことができる。後者のためには Particle Mesh 法などが必要となるが、これは FDPS の拡張機能として用意されている。

短距離力には、小分類が 4 つ存在する。短距離力の場合、粒子はある距離より離れた粒子からの作用は受けない。すなわち必ずカットオフが存在する。このカットオフ長の決め方によって、小分類がなされる。すなわち、全粒子のカットオフ長が等しいコンスタントカーネル、カットオフ長が作用を受ける粒子固有の性質で決まるギャザーカーネル、カットオフ長が作用を与える粒子固有の性質で決まるスキヤッタカーネル、カットオフ長が作用を受ける粒子と作用を与える粒子の両方の性質で決まるシンメトリックカーネルである。コンスタントカーネルは分子動力学における LJ 力に適用でき、その他のカーネルは SPH などに適用できる。

ユーザーは、粒子間相互作用や粒子の軌道積分などを、C++ を用いて記述する。

## 3 入門：サンプルコードを動かしてみよう

本節では、まずははじめに、FDPS の動作環境、必要なソフトウェア、インストール方法などを説明し、その後、サンプルコードの使用方法を説明する。サンプルコードの中身に関しては、次節(第4節)で詳しく述べる。

### 3.1 動作環境

FDPS は Linux, Mac OS X, Windows などの OS 上で動作する。

### 3.2 必要なソフトウェア

本節では、FDPS を使用する際に必要となるソフトウェアを記述する。まず標準機能を用いるのに必要なソフトウェア、次に拡張機能を用いるのに必要なソフトウェアを記述する。

#### 3.2.1 標準機能

本節では、FDPS の標準機能のみを使用する際に必要なソフトウェアを記述する。最初に逐次処理機能のみを用いる場合(並列処理機能を用いない場合)に必要なソフトウェアを記述する。次に並列処理機能を用いる場合に必要なソフトウェアを記述する。

##### 3.2.1.1 逐次処理

逐次処理の場合に必要なソフトウェアは以下の通りである。

- make
- C++コンパイラ (gcc バージョン 8 以降なら確実)
- Ruby (PIKG に必要。3.0.2 で動作確認済)

##### 3.2.1.2 並列処理

本節では、FDPS の並列処理機能を用いる際に必要なソフトウェアを記述する。まず、OpenMP を使用する際に必要なソフトウェア、次に MPI を使用する際に必要なソフトウェア、最後に OpenMP と MPI を同時に使用する際に必要なソフトウェアを記述する。

#### 3.2.1.2.1 OpenMP

OpenMP を使用する際に必要なソフトウェアは以下の通り。

- make
- OpenMP 対応の C++コンパイラ (gcc version 8 以降なら確実)

#### 3.2.1.2.2 MPI

MPI を使用する際に必要なソフトウェアは以下の通り。

- make
- MPI version 1.3 対応の C++コンパイラ (Open MPI 1.6.4 で動作確認済)

#### 3.2.1.2.3 MPI+OpenMP

MPI と OpenMP を同時に使用する際に必要なソフトウェアは以下の通り。

- make
- MPI version 1.3 と OpenMP に対応の C++コンパイラ (Open MPI 1.6.4 で動作確認済, K コンパイラバージョン 1.2.0 で動作確認済)

### 3.2.2 拡張機能

本節では、FDPS の拡張機能を使用する際に必要なソフトウェアについて述べる。FDPS の拡張機能には Particle Mesh がある。以下では Particle Mesh を使用する際に必要なソフトウェアを述べる。

#### 3.2.2.1 Particle Mesh

Particle Mesh を使用する際に必要なソフトウェアは以下の通りである。

- make
- MPI version 1.3 と OpenMP に対応の C++コンパイラ (Open MPI 1.6.4 で動作確認済)
- FFTW 3.3 以降

### 3.3 インストール

本節では、FDPS のインストールについて述べる。取得方法、ビルド方法について述べる。

### 3.3.1 取得方法

ここではFDPSの取得方法を述べる。最初に最新バージョンの取得方法、次に過去のバージョンの取得方法を述べる。

#### 3.3.1.1 最新バージョン

以下の方法のいずれかでFDPSの最新バージョンを取得できる。

- ブラウザから
  1. ウェブサイト <https://github.com/FDPS/FDPS> で”Download ZIP”をクリックし、ファイル FDPS-master.zip をダウンロード
  2. FDPS を展開したいディレクトリに移動し、圧縮ファイルを展開
- コマンドラインから
  - Subversion を用いる場合：以下のコマンドを実行するとディレクトリ trunk の下を Subversion レポジトリとして使用できる

```
$ svn co --depth empty https://github.com/FDPS/FDPS  
$ cd FDPS  
$ svn up trunk
```

- Git を用いる場合：以下のコマンドを実行するとカレントディレクトリにディレクトリ FDPS ができる、その下を Git のレポジトリとして使用できる

```
$ git clone git://github.com/FDPS/FDPS.git
```

#### 3.3.1.2 過去のバージョン

以下の方法でブラウザからFDPSの過去のバージョンを取得できる。

- ウェブサイト <https://github.com/FDPS/FDPS/releases> に過去のバージョンが並んでいるので、ほしいバージョンをクリックし、ダウンロード
- FDPS を展開したいディレクトリに移動し、圧縮ファイルを展開

### 3.3.2 インストール方法

configureなどをする必要はない。

## 3.4 サンプルコードの使用方法

本節ではサンプルコードの使用方法について説明する。サンプルコードには重力  $N$  体シミュレーションコードと、SPH シミュレーションコードがある。最初に重力  $N$  体シミュレーションコード、次に SPH シミュレーションコードの使用について記述する。サンプルコードは拡張機能を使用していない。

### 3.4.1 重力 $N$ 体シミュレーションコード

本サンプルコードは、FDPS を用いて書かれた無衝突系の  $N$  体計算コードである。このコードでは一様球のコールドコラプス問題を計算し、粒子分布のスナップショットを出力する。

#### 3.4.1.1 概要

以下の手順で本コードを使用できる。

- ディレクトリ \$(FDPS)/sample/c++/nbody に移動。これ以後、ディレクトリ \$(FDPS) は FDPS の最も上の階層のディレクトリを指す (\$(FDPS) は環境変数にはなっていない)。\$(FDPS) は FDPS の取得によって異なり、ブラウザからなら FDPS-master, Subversion からなら trunk, Git からなら FDPS である。
- カレントディレクトリにある Makefile を編集
- コマンドライン上で make を実行
- nbody.out ファイルの実行
- 結果の解析

最後に x86 版 Phantom-GRAPE および PIKG を使う場合について述べる。

#### 3.4.1.2 ディレクトリ移動

ディレクトリ \$(FDPS)/sample/c++/nbody に移動する。

#### 3.4.1.3 Makefile の編集

Makefile の編集項目は以下の通りである。OpenMP と MPI を使用するかどうかで編集方法が変ることに注意。

- OpenMP も MPI も使用しない場合
  - 変数 CC に C++コンパイラを代入する

- OpenMP のみ使用の場合
  - 変数 CC に OpenMP 対応の C++コンパイラを代入する
  - CFLAGS += -DPARTICLE\_SIMULATOR\_THREAD\_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す。Intel コンパイラの場合には、-fopenmp を-qopenmp か-openmp に変更する (どちらを指定すべきかはコンパイラのバージョンに依る)。
- MPI のみ使用の場合
  - 変数 CC に MPI 対応の C++コンパイラを代入する
  - CFLAGS += -DPARTICLE\_SIMULATOR\_MPI\_PARALLEL の行のコメントアウトを外す
- OpenMP と MPI の同時使用の場合
  - 変数 CC に MPI 対応の C++コンパイラを代入する
  - CFLAGS += -DPARTICLE\_SIMULATOR\_THREAD\_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す。Intel コンパイラの場合には、-fopenmp を-qopenmp か-openmp に変更する (どちらを指定すべきかはコンパイラのバージョンに依る)。
  - CFLAGS += -DPARTICLE\_SIMULATOR\_MPI\_PARALLEL の行のコメントアウトを外す

#### 3.4.1.4 make の実行

make コマンドを実行する。

#### 3.4.1.5 実行

実行方法は以下の通りである。

- MPI を使用しない場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ ./nbody.out
```

- MPI を使用する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ MPIRUN -np NPROC ./nbody.out
```

ここで、MPIRUN には mpirun や mpiexec などが、NPROC には使用する MPI プロセスの数が入る。

正しく終了すると、以下のようなログを出力する。energy error は絶対値で  $1 \times 10^{-3}$  のオーダーに収まっていればよい。

```

time: 9.5000000 energy error: -3.804653e-03
time: 9.6250000 energy error: -3.971175e-03
time: 9.7500000 energy error: -3.822343e-03
time: 9.8750000 energy error: -3.884310e-03
MemoryPool::finalize() is completed!
***** FDPS has successfully finished. *****

```

### 3.4.1.6 結果の解析

ディレクトリ `result` に粒子分布を出力したファイル "000x.dat" ができている。x は 0 から 9 の値で、時刻を表す。

出力ファイルフォーマットは 1 列目から順に粒子の ID, 粒子の質量、位置の x, y, z 座標、粒子の x, y, z 軸方向の速度である。

ここで実行したのは、粒子数 1024 個からなる一様球 (半径 3) のコールドコラプスである。コマンドライン上で以下のコマンドを実行すれば、時刻 9 における xy 平面に射影した粒子分布を見ることができる。

```

$ gnuplot
$ plot "result/0009.dat" using 3:4

```

他の時刻の粒子分布をプロットすると、一様球が次第に収縮し、その後もう一度膨張する様子を見ることができる (図 1 参照)。

粒子数を 10000 個にして計算を行いたい場合には以下のように実行すればよい (MPI を使用しない場合)。

```
$ ./nbody.out -N 10000
```

### 3.4.1.7 x86 版 Phantom-GRAPE を使う場合

Phantom-GRAPE は SIMD 命令を効率的に活用することで重力相互作用の計算を高速に実行するライブラリである (詳細は Tanikawa et al.[2012, New Astronomy, 17, 82] と Tanikawa et al.[2012, New Astronomy, 19, 74] を参照のこと)。

まず、使用環境を確認する。SIMD 命令セット AVX をサポートする Intel CPU または AMD CPU を搭載したコンピュータを使用しているならば、x86 版 Phantom-GRAPE を使用可能である。

次にディレクトリ \$(FDPS)/src/phantom\_grape\_x86/G5/newton/libpg5 に移動して、ファイル `Makefile` を編集し、コマンド `make` を実行して Phantom-GRAPE のライブラリ `libpg5.a` を作る。

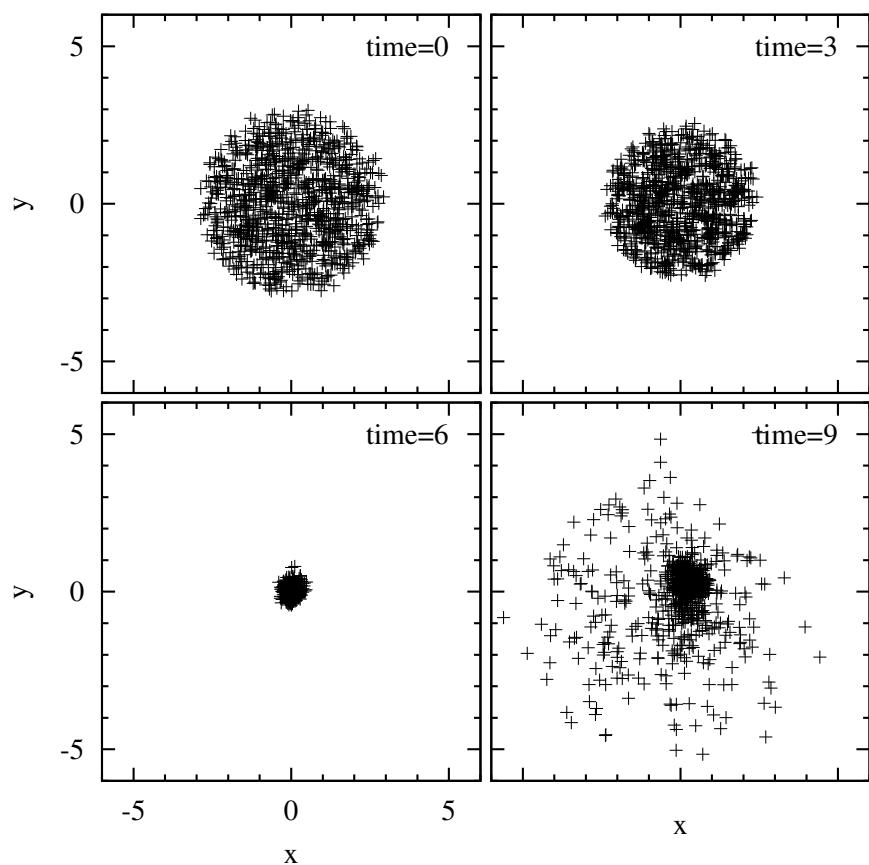


図 1:

最後に、ディレクトリ\$(FDPS)/sample/c++/nbody に戻り、ファイル Makefile 内の  
 ''#use\_phantom\_grape\_x86 = yes'' の''#''を消す。make を実行してコンパイルする(OpenMP,  
 MPI の使用・不使用どちらにも対応)と、x86 版 Phantom-GRAPE を使用したコードができる  
 ている。上と同様の方法で実行・結果の確認を行うとさきほどと同様の結果が得られる。

Intel Core i5-3210M CPU @ 2.50GHz の 2 コアで性能テスト(OpenMP 使用、MPI 不使  
 用)をした結果、粒子数 8192 の場合に、Phantom-GRAPE を使うと、使わない場合に比べ  
 て、最大で 5 倍弱ほど高速なコードとなる。以下が最適化された実行例。

```
$ ./nbody.out -N 8192 -n 256
```

ここで、オプション「-n 数値」で相互作用リストを共有する粒子数の上限を指定している。

#### 3.4.1.8 PIKG を使う場合

PIKG は DSL(ドメイン固有言語)記述から様々なアーキテクチャ向けに最適化された粒子  
 間相互作用カーネルを生成するカーネルジェネレータである。

ディレクトリ\$(FDPS)/sample/c++/nbody のファイル Makefile 内の  
 ''#use\_pikg\_x86 = yes'' の''#''を消す。この状態で make を実行してコンパイルする  
 (OpenMP, MPI の使用・不使用どちらにも対応)と、PIKG から生成されたカーネルを使用  
 した実行ファイル nbody.out ができる。上と同様の方法で実行・結果の確認を行うと  
 さきほどと同様の結果が得られる。

デフォルトでは、通常の C++ コードと同等の reference モードの相互作用カーネルが生  
 成される。Makefile 内の #COVERSION\_TYPE とその直後にある #CFLAGS の行のコメントア  
 ウトを外すと、別のアーキテクチャ(AVX2 や AVX-512)向けにコードを生成できる。AVX2  
 モードを使う場合は、利用する CPU が AVX2 及び FMA に対応していなくてはならない。さ  
 らに AVX-512 モードを使う場合には利用する CPU が AVX-512F および AVX-512DQ に対  
 応していなくてはならない。

#### 3.4.1.9 NVIDIA の GPU を使う場合

サンプルには CUDA によって書かれた NVIDIA の GPU 用のカーネルも付属している。  
 ディレクトリ\$(FDPS)/sample/c++/nbody の中のファイル Makefile 内の  
 ''#use\_cuda\_gpu = yes'' の''#''を消し、更に自分の環境に応じて、CUDA\_HOME の場所を  
 設定する。make を実行してコンパイルする(OpenMP, MPI の使用・不使用どちらにも対応)  
 と、GPU を使用したコードができる。上と同様の方法で実行・結果の確認を行うと  
 さきほどと同様の結果が得られる。

#### 3.4.2 SPH シミュレーションコード

本サンプルコードには標準 SPH 法が FDPS を使って実装されている。簡単のため、smooth-  
 ing length は一定値を取ると仮定している。コードでは、3 次元の衝撃波管問題の初期条件

を生成し、衝撃波管問題を実際に計算する。

#### 3.4.2.1 概要

以下の手順で本コードを使用できる。

- ディレクトリ\$(FDPS)/sample/c++/sphに移動
- カレントディレクトリにある `Makefile` を編集（後述）
- コマンドライン上で `make` を実行
- `sph.out` ファイルの実行（後述）
- 結果の解析（後述）

#### 3.4.2.2 ディレクトリ移動

ディレクトリ\$(FDPS)/sample/c++/sphに移動する。

#### 3.4.2.3 Makefile の編集

`Makefile` の編集の仕方は  $N$  体計算の場合と同一なので、第 3.4.1.3 節を参照されたい。

#### 3.4.2.4 make の実行

`make` コマンドを実行する。

#### 3.4.2.5 実行

実行方法は以下の通りである。

- MPI を使用しない場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ ./sph.out
```

- MPI を使用する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ MPIRUN -np NPROC ./sph.out
```

ここで、`MPIRUN` には `mpirun` や `mpiexec` などが、`NPROC` には使用する MPI プロセスの数が入る。

正しく終了すると以下のようなログを出力する。

```
***** FDPS has successfully finished. *****
```

### 3.4.2.6 結果の解析

実行するとディレクトリ `result` にファイルが出力されている。ファイル名は”00xx.txt”(xには数字が入る)となっている。ファイル名は時刻を表す。出力ファイルフォーマットは1列目から順に粒子のID、粒子の質量、位置のx, y, z座標、粒子のx, y, z軸方向の速度、密度、内部エネルギー、圧力である。

コマンドライン上で以下のコマンドを実行すれば、横軸に粒子のx座標、縦軸に粒子の密度をプロットできる(時刻は40)。

```
$ gnuplot
$ plot "result/0040.txt" using 3:9
```

正しい答が得られれば、図2のような図を描ける。

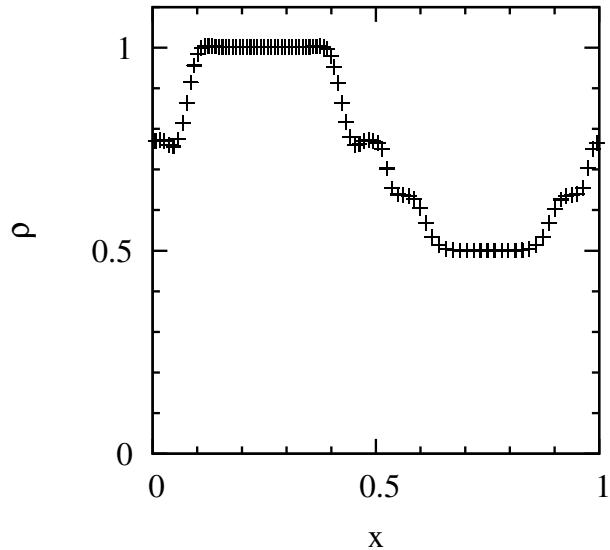


図 2: 衝撃波管問題の時刻  $t = 40$  における密度分布

## 4 サンプルコードの解説

本節では、前節(第3節)で動かしたサンプルコードについての解説を行う。特に、ユーザが定義しなければならないクラス(以後、ユーザ定義型と呼ぶ)やFDPSの各種APIの使い方について詳しく述べる。説明の重複を避けるため、いくつかの事項に関しては、その詳細な説明がN体シミュレーションコードの節でのみ行われている。そのため、SPHシミュレーションだけに興味があるユーザも、N体シミュレーションコードの節に目を通して頂きたい。

### 4.1 N体シミュレーションコード

#### 4.1.1 ソースファイルの場所と構成

ソースファイルは\$(FDPS)/sample/c++/nbody 以下にある。サンプルコードは、次節で説明するユーザ定義型が記述されたソースコード `user-defined.hpp` と、N体シミュレーションのメインループ等が記述されたソースコード `main.cpp` から構成される。この他に、GCC用の `Makefile` がある。

#### 4.1.2 ユーザー定義型・ユーザ定義関数

本節では、FDPSの機能を用いてN体計算を行う際、ユーザーが記述しなければならないクラスと `void` 関数について記述する。

##### 4.1.2.1 FullParticle型

ユーザーはユーザ定義型の1つ `FullParticle` 型を記述しなければならない。`FullParticle` 型には、シミュレーションを行うにあたって、N体粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 1に本サンプルコードの `FullParticle` 型の実装例を示す(`user-defined.hpp`を参照)。

Listing 1: `FullParticle` 型

```

1 class FPGrav{
2 public:
3     PS::S64      id;
4     PS::F64      mass;
5     PS::F64vec   pos;
6     PS::F64vec   vel;
7     PS::F64vec   acc;
8     PS::F64      pot;
9     static PS::F64 eps;
10
11    PS::F64vec  getPos() const {
12        return pos;
13    }

```

```

14     PS::F64 getCharge() const {
15         return mass;
16     }
17
18     void copyFromFP(const FPGrav & fp){
19         mass = fp.mass;
20         pos = fp.pos;
21     }
22
23     void copyFromForce(const FPGrav & force) {
24         acc = force.acc;
25         pot = force.pot;
26     }
27
28     void clear() {
29         acc = 0.0;
30         pot = 0.0;
31     }
32
33     void writeAscii(FILE* fp) const {
34         fprintf(fp, "%ld\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\n",
35                 this->id, this->mass,
36                 this->pos.x, this->pos.y, this->pos.z,
37                 this->vel.x, this->vel.y, this->vel.z);
38     }
39
40     void readAscii(FILE* fp) {
41         if(fscanf(fp, "%ld\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
42                   &this->id, &this->mass,
43                   &this->pos.x, &this->pos.y, &this->pos.z,
44                   &this->vel.x, &this->vel.y, &this->vel.z) != 8) exit(-1)
45             ;
46     }
47 };
48
49 #ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86

```

本サンプルコードでは、FullParticle型がEssentialParticleI型、EssentialParticleJ型、そして、Force型を兼ねている。また、FullParticle型には、データのコピーするのに必要なメンバ関数 copyFromFP と copyFromForce を持たせている。その他、粒子質量を返す関数である getCharge、粒子座標を返す関数である getPos が必要になる。また、積算対象のメンバ変数である加速度とポテンシャルを 0 クリアするための関数 clear が必要になる。本サンプルコードでは、FDPS に備わっているファイル入出力関数を使用するため、それに必要な関数である writeAscii() と readAscii() を書いてある。

#### 4.1.2.2 相互作用関数 calcForceEpEp

ユーザーは粒子間相互作用の仕方を記述した相互作用関数 calcForceEpEp を記述しなければならない。void 関数 calcForceEpEp には、粒子-粒子相互作用計算の具体的な内容を書く必要がある。Listing 2 に、本サンプルコードでの実装を示す (user-defined.hpp を参照)。

Listing 2: 関数 calcForceEpEp

```

1      const TParticleJ * ep_j,
2      const PS::S32 n_jp,
3      FPGrav * force) {
4      PS::F64 eps2 = FPGrav::eps * FPGrav::eps;
5      for(PS::S32 i = 0; i < n_ip; i++) {
6          PS::F64vec xi = ep_i[i].getPos();
7          PS::F64vec ai = 0.0;
8          PS::F64 poti = 0.0;
9          for(PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++) {
10             PS::F64vec rij = xi - ep_j[j].getPos();
11             PS::F64 r3_inv = rij * rij + eps2;
12             PS::F64 r_inv = 1.0/sqrt(r3_inv);
13             r3_inv = r_inv * r_inv;
14             r_inv *= ep_j[j].getCharge();
15             r3_inv *= r_inv;
16             ai -= r3_inv * rij;
17             poti -= r_inv;
18         }
19         force[i].acc += ai;
20         force[i].pot += poti;
21     }
22 }
23 #endif

```

ここに示したのは、Phantom-GRAPE ライブラリを使用せずに CPU で実行する場合の実装である。

本サンプルコードではテンプレート関数<sup>注 1)</sup>を用いて実装している。また、テンプレート関数の引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。

#### 4.1.3 プログラム本体

本節では、FDPS を用いて  $N$  体計算を行うにあたり、メイン関数に書かれるべき関数について解説する。メイン関数はサンプルコード nbody.cpp 内に記述されている。

##### 4.1.3.1 ヘッダーファイルのインクルード

FDPS の標準機能を利用できるようにするために、particle\_simulator.hpp をインクルードする。

Listing 3: ヘッダーファイル particle\_simulator.hpp のインクルード

```
1 #include <particle_simulator.hpp>
```

<sup>注 1)</sup> テンプレート関数とは C++ 言語のテンプレート機能を関数に適用することで汎用的な関数としたものである。通常の関数では、関数の型および関数の引数の型をその場ですべて指定して記述/定義するが、テンプレート関数では、template <...> 内に指定された一般的なデータ型・クラスを関数定義に使用することができる（“一般的なクラス”の情報は、関数呼び出しの際にテンプレート引数として渡す。このため、コンパイル時にテンプレート関数のすべての型は問題なく決定される）。これによって、一般的な関数を定義することが可能となる。

### 4.1.3.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メイン関数に記述する。

Listing 4: FDPS の開始

---

```
1 PS::Initialize(argc, argv);
```

---

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メイン関数の最後に次のように記述する。

Listing 5: FDPS の終了

---

```
1 PS::Finalize();
```

---

### 4.1.3.3 オブジェクトの生成・初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について解説する。

#### 4.1.3.3.1 オブジェクトの生成

今回の計算では、粒子群クラス、領域クラスに加え、重力計算用の相互作用ツリーを一本生成する必要がある。以下にそのコードを記す。これらはサンプルコード `nbody.cpp` の `main` 関数内に記述されている。

Listing 6: オブジェクトの生成

---

```
1 PS::DomainInfo dinfo;
2 PS::ParticleSystem<FPGrav> system_grav;
3 PS::TreeForForceLong<FPGrav, FPGrav, FPGrav>::Monopole tree_grav;
```

---

#### 4.1.3.3.2 領域情報オブジェクトの初期化

ユーザーはオブジェクトを作成したら、そのオブジェクトの初期化を行う必要がある。本サンプルコードでは周期境界等は用いていないため、領域情報オブジェクトの初期化は API `initialize` を実行するだけでよい:

Listing 7: 領域クラスの初期化

---

```
1 const PS::F32 coef_ema = 0.3;
2 dinfo.initialize(coef_ema);
```

---

ここで、API `initialize` の第 1 引数は領域分割に使用される指数移動平均の平滑化係数を表す。この係数の意味については仕様書に詳しい解説があるので、そちらを参照されたい。

#### 4.1.3.3.3 粒子群オブジェクトの初期化

次に、粒子群オブジェクトの初期化を行う必要がある。粒子群オブジェクトの初期化は、API `initialize` で行う:

Listing 8: 粒子群クラスの初期化

---

```
1 system_grav.initialize();
```

---

#### 4.1.3.3.4 ツリーオブジェクトの初期化

次に、ツリーオブジェクトの初期化を行う必要がある。ツリーオブジェクトの初期化は API `initialize` で行う。この API には、引数としてツリーオブジェクト内部で使用する配列の大きさの初期値を渡す必要がある。これはローカル粒子数 (`n_loc`) 程度で十分であるため、そのようにセットする:

Listing 9: 相互作用ツリークラスの初期化

---

```
1 tree_grav.initialize(n_loc, theta, n_leaf_limit, n_group_limit);
```

---

この API には 3 つの省略可能引数が存在し、サンプルコードではこれらを省略せずに指定している:

- `theta` — ツリー法で力の計算をする場合の見込み角についての基準
- `n_leaf_limit` — ツリーを切るのをやめる粒子数の上限
- `n_group_limit` — 相互作用リストを共有する粒子数の上限

#### 4.1.3.4 ループ

本節では、時間積分ループの中で行わなければならないことについて、解説する。

##### 4.1.3.4.1 領域分割の実行

まずは、粒子分布に基いて、領域分割を実行する。本サンプルコードでは、これを領域情報オブジェクトの API `decomposeDomainAll` を用いて行っている:

Listing 10: 領域分割の実行

---

```
1 if(n_loop % 4 == 0){
2     dinfo.decomposeDomainAll(system_grav);
3 }
```

---

ここで、計算時間の節約のため、領域分割は 4 ループ毎に 1 回だけ行うようにしている。

##### 4.1.3.4.2 粒子交換の実行

次に、領域情報に基いて、プロセス間の粒子の情報を交換する。これには、粒子群オブジェクトの API `exchangeParticle` を用いる:

---

Listing 11: 粒子交換の実行

---

```
1 system_grav.exchangeParticle(dinfo);
```

---

#### 4.1.3.4.3 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が終了したら、相互作用の計算を行う。これには、ツリーオブジェクトの API `calcForceAllAndWriteBack` を用いる:

---

Listing 12: 相互作用計算の実行

---

```
1 tree_grav.calcForceAllAndWriteBack(CalcGravity<FPGrav>,
2                                     CalcGravity<PS::SPJMonopole>,
3                                     system_grav,
4                                     dinfo);
```

---

ここで、メソッドの引数に `CalcGravity<...>` のような記述があるが、この`<...>`内に書かれているものがテンプレート引数である。

#### 4.1.3.4.4 時間積分

本サンプルコードでは、時間積分を Leapfrog 時間積分法によって行う。時間積分は形式的に、 $K(\frac{\Delta t}{2})D(\Delta t)K(\frac{\Delta t}{2})$  と表される。ここで、 $\Delta t$  は時間刻み、 $K(\cdot)$  は速度を指定された時間だけ時間推進するオペレータ、 $D(\cdot)$  は位置を指定された時間だけ時間推進するオペレータである。本サンプルコードにおいて、これらのオペレータは、`void` 関数 `kick` と `void` 関数 `drift` として実装している。

時間積分ループの最初で、最初の  $D(\Delta t)K(\frac{\Delta t}{2})$  の計算を行い、粒子の座標と速度の情報を更新している:

---

Listing 13:  $D(\Delta t)K(\frac{\Delta t}{2})$  オペレータの計算

---

```
1 kick(system_grav, dt * 0.5);
2 drift(system_grav, dt);
```

---

時間積分ループの次の部分では、力の計算を行い、その後、最後の  $K(\frac{\Delta t}{2})$  の計算を行っている:

---

Listing 14:  $K(\frac{\Delta t}{2})$  オペレータの計算

---

```
1 kick(system_grav, dt * 0.5);
```

---

#### 4.1.4 ログファイル

計算が正しく開始すると、標準出力に、時間・エネルギー誤差の 2 つが出力される。以下はその出力の最も最初のステップでの例である。

---

Listing 15: 標準出力の例

---

```
1 time: 0.0000000000E+000, energy error: -0.0000000000E+000
```

---

## 4.2 固定長SPHシミュレーションコード

本節では、前節(第3節)で使用した、固定 smoothing length での標準 SPH 法のサンプルコードの詳細について解説する。

### 4.2.1 ソースファイルの場所と構成

ソースファイルは\$(FDPS)/sample/c++/sph 以下にある。サンプルコードは、次節で説明するユーザ定義型や SPH シミュレーションのメインループ等すべてが記述された main.cpp と GCC 用 Makefile から構成される。

### 4.2.2 ユーザー定義型・ユーザ定義関数

本節では、FDPS の機能を用いて SPH の計算を行う際に、ユーザーが記述しなければならないクラスと void 関数について記述する。

#### 4.2.2.1 FullParticle 型

ユーザーはユーザ定義型の 1 つ FullParticle 型を記述しなければならない。FullParticle 型には、シミュレーションを行うにあたって、SPH 粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 16 に本サンプルコード中で用いる FullParticle 型の実装例を示す ( main.cpp を参照)。

Listing 16: FullParticle 型

---

```

1 struct FP{
2     PS::F64 mass;
3     PS::F64vec pos;
4     PS::F64vec vel;
5     PS::F64vec acc;
6     PS::F64 dens;
7     PS::F64 eng;
8     PS::F64 pres;
9     PS::F64 smth;
10    PS::F64 snds;
11    PS::F64 eng_dot;
12    PS::F64 dt;
13    PS::S64 id;
14    PS::F64vec vel_half;
15    PS::F64 eng_half;
16    void copyFromForce(const Dens& dens){
17        this->dens = dens.dens;
18    }
19    void copyFromForce(const Hydro& force){
20        this->acc = force.acc;
21        this->eng_dot = force.eng_dot;
22        this->dt = force.dt;
23    }
24    PS::F64 getCharge() const{

```

```

25     return this->mass;
26 }
27 PS::F64vec getPos() const{
28     return this->pos;
29 }
30 PS::F64 getRSearch() const{
31     return kernelSupportRadius * this->smth;
32 }
33 void setPos(const PS::F64vec& pos){
34     this->pos = pos;
35 }
36 void writeAscii(FILE* fp) const{
37     fprintf(fp,
38         "%" PRId64 "\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t"
39         "%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
40         this->id, this->mass,
41         this->pos.x, this->pos.y, this->pos.z,
42         this->vel.x, this->vel.y, this->vel.z,
43         this->dens, this->eng, this->pres);
44 }
45 void readAscii(FILE* fp){
46     fscanf(fp,
47         "%" SCNd64 "\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t"
48         "%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
49         &this->id, &this->mass,
50         &this->pos.x, &this->pos.y, &this->pos.z,
51         &this->vel.x, &this->vel.y, &this->vel.z,
52         &this->dens, &this->eng, &this->pres);
53 }
54 void setPressure(){
55     const PS::F64 hcr = 1.4;
56     pres = (hcr - 1.0) * dens * eng;
57     snds = sqrt(hcr * pres / dens);
58 }
59 };

```

また、FullParticle 型には後述する Force 型から、結果をコピーするのに必要なメンバ関数を持つ必要がある。その他、粒子質量を返す関数である getCharge()、粒子座標を返す関数である getPos()、近傍粒子の探索半径を返す関数である getRSearch()、粒子の座標を書き込む関数である setPos() が必要になる。本サンプルコードでは、FDPS に備わっているファイル入出力関数を用いる。そのため、これに必要な関数である writeAscii() と readAscii() を書いてある。また、これらに加え、状態方程式から圧力を計算するメンバ関数である、setPressure() が記述されているが、この関数は FDPS が用いるものではないため、必須のものではないことに注意する。

#### 4.2.2.2 EssentialParticleI 型

ユーザーは EssentialParticleI 型を記述しなければならない。EssentialParticleI 型には、Force の計算を行う際、 $i$  粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。また、本サンプルコード中では、EssentialParticleJ 型も兼ねているため、 $j$  粒

子が持っているべき全ての物理量もメンバ変数として持っている必要がある。Listing 17 に、本サンプルコードの EssentialParticleI 型の実装例を示す (`main.cpp` 参照):

Listing 17: EssentialParticleI 型

```

1 struct EP{
2     PS::F64vec pos;
3     PS::F64vec vel;
4     PS::F64 mass;
5     PS::F64 smth;
6     PS::F64 dens;
7     PS::F64 pres;
8     PS::F64 snds;
9     void copyFromFP(const FP& rp){
10         this->pos = rp.pos;
11         this->vel = rp.vel;
12         this->mass = rp.mass;
13         this->smth = rp.smth;
14         this->dens = rp.dens;
15         this->pres = rp.pres;
16         this->snds = rp.snds;
17     }
18     PS::F64vec getPos() const{
19         return this->pos;
20     }
21     PS::F64 getRSearch() const{
22         return kernelSupportRadius * this->smth;
23     }
24     void setPos(const PS::F64vec& pos){
25         this->pos = pos;
26     }
27 };

```

EssentialParticleI 型には前述した FullParticle 型から、値をコピーするのに必要なメンバ関数を持つ必要がある。その他、粒子座標を返す関数である `getPos()`、近傍粒子の探索半径を返す関数である `getRSearch()`、粒子の座標を書き込む関数である `setPos()` が必要になる。

#### 4.2.2.3 Force 型

ユーザーは Force 型を記述しなければならない。Force 型には、Force の計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。また、本サンプルコード中では、Force の計算は密度の計算と流体相互作用計算の 2 つが存在するため、Force 型は 2 つ書く必要がある。Listing 18 に、本サンプルコード中で用いる Force 型の実装例を示す。

Listing 18: Force 型

```

1 class Dens{
2     public:
3     PS::F64 dens;
4     PS::F64 smth;

```

---

```

5     void clear(){
6         dens = 0;
7     }
8 };
9 class Hydro{
10    public:
11     PS::F64vec acc;
12     PS::F64 eng_dot;
13     PS::F64 dt;
14     void clear(){
15         acc = 0;
16         eng_dot = 0;
17     }
18 };

```

---

この例の Dens クラスには、smoothing length を表すメンバ変数 smth が用意されている。本来、固定長 SPH では、Force 型に smoothing length に対応するメンバを持たせる必要はない。しかし、ここでは、ユーザが将来的に可変長 SPH に移行することを想定して用意してある。可変長 SPH の formulation の 1 つである Springel [2005,MNRAS,364,1105] の方法では、密度計算と同時に smoothing length を計算する必要がある。そのような formulation を実装する場合には、この例のように、Force 型に smoothing length を持たせる必要が生じる。本サンプルコードでは固定長 SPH を使うため、メンバ関数 clear で smth を 0 クリアされないようにしている(0 クリアされては密度計算が破綻するため)。

また、Hydro クラスには各粒子の時間刻みを表すメンバ変数 dt が用意されている。本サンプルコードでは、dt を 0 クリアしていない。これは dt が積算対象でないため、0 クリアが不要であるからである。

#### 4.2.2.4 相互作用関数 calcForceEpEp

ユーザーは粒子間相互作用の仕方を記述した相互作用関数 calcForceEpEp を記述しなければならない。相互作用関数 calcForceEpEp には、各 Force 型に対応する粒子-粒子相互作用計算の具体的な内容を書く必要がある。Listing 19 に、本サンプルコードでの実装を示す(`main.cpp` を参照)。

Listing 19: 関数 calcForceEpEp

---

```

1 class CalcDensity{
2     public:
3     void operator () (const EP* const ep_i, const PS::S32 Nip,
4                         const EP* const ep_j, const PS::S32 Njp,
5                         Dens* const dens){
6         for(PS::S32 i = 0 ; i < Nip ; ++i){
7             dens[i].clear();
8             for(PS::S32 j = 0 ; j < Njp ; ++j){
9                 const PS::F64vec dr = ep_j[j].pos - ep_i[i].pos;
10                dens[i].dens += ep_j[j].mass * W(dr, ep_i[i].smth);
11            }
12        }
13    }
14 };

```

---

```

15
16 class CalcHydroForce{
17     public:
18     void operator () (const EP* const ep_i, const PS::S32 Nip,
19                         const EP* const ep_j, const PS::S32 Njp,
20                         Hydro* const hydro){
21         for(PS::S32 i = 0; i < Nip ; ++ i){
22             hydro[i].clear();
23             PS::F64 v_sig_max = 0.0;
24             for(PS::S32 j = 0; j < Njp ; ++j){
25                 const PS::F64vec dr = ep_i[i].pos - ep_j[j].pos;
26                 const PS::F64vec dv = ep_i[i].vel - ep_j[j].vel;
27                 const PS::F64 w_ij = (dv * dr < 0) ? dv * dr / sqrt(dr * dr) :
28                     0;
29                 const PS::F64 v_sig = ep_i[i].snsd + ep_j[j].snsd - 3.0 * w_ij
30                     ;
31                 v_sig_max = std::max(v_sig_max, v_sig);
32                 const PS::F64 AV = - 0.5 * v_sig * w_ij / (0.5 * (ep_i[i].dens
33                     + ep_j[j].dens));
34                 const PS::F64vec gradW_ij = 0.5 * (gradW(dr, ep_i[i].smth) +
35                     gradW(dr, ep_j[j].smth));
36                 hydro[i].acc -= ep_j[j].mass * (ep_i[i].pres / (ep_i[i].
37                     dens * ep_i[i].dens) + ep_j[j].pres / (ep_j[j].dens *
38                     ep_j[j].dens) + AV) * gradW_ij;
39                 hydro[i].eng_dot += ep_j[j].mass * (ep_i[i].pres / (ep_i[i].
40                     dens * ep_i[i].dens) + 0.5 * AV) * dv * gradW_ij;
41             }
42             hydro[i].dt = C_CFL * 2.0 * ep_i[i].smth / v_sig_max;
43         }
44     }
45 };

```

本 SPH シミュレーションコードでは、2 種類の相互作用があるため、calcForceEpEp は 2 つ記述する必要がある。いずれの場合にも、void 関数の仮引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。

### 4.2.3 プログラム本体

本節では、FDPS を用いて SPH 計算を行う際に、メイン関数に書かれるべき関数について解説する。

#### 4.2.3.1 ヘッダーファイルのインクルード

FDPS の標準機能を利用できるようにするために、particle\_simulator.hpp をインクルードする。

Listing 20: ヘッダーファイル particle\_simulator.hpp のインクルード

---

```
1 #include <particle_simulator.hpp>
```

---

#### 4.2.3.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メイン関数に記述する。

Listing 21: FDPS の開始

---

```
1 PS::Initialize(argc, argv);
```

---

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メイン関数の最後に次のように記述する。

Listing 22: FDPS の終了

---

```
1 PS::Finalize();
```

---

#### 4.2.3.3 オブジェクトの生成・初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

##### 4.2.3.3.1 オブジェクトの生成

SPH では、粒子群オブジェクト、領域情報オブジェクトに加え、密度計算用に Gather 型の短距離力用ツリーを 1 本、流体相互作用計算用に Symmetry 型の短距離力用ツリーを 1 本生成する必要がある。以下にそのコードを記す。

Listing 23: オブジェクトの生成

---

```
1 PS::ParticleSystem<FP> sph_system;
2 PS::DomainInfo dinfo;
3 PS::TreeForForceShort<Dens, EP, EP>::Gather dens_tree;
4 PS::TreeForForceShort<Hydro, EP, EP>::Symmetry hydr_tree;
```

---

##### 4.2.3.3.2 領域情報オブジェクトの初期化

ユーザーはオブジェクトを作成したら、そのオブジェクトの初期化を行う必要がある。ここでは、まず領域情報オブジェクトの初期化について、解説する。領域情報オブジェクトの初期化が終わった後、領域情報オブジェクトに周期境界の情報と、境界の大きさをセットする必要がある。今回のサンプルコードでは、 $x, y, z$  方向に周期境界を用いる。

Listing 24: 領域クラスの初期化

---

```
1 dinfo.initialize();
2 dinfo.setBoundaryCondition(PS::BOUNDARY_CONDITION_PERIODIC_XYZ);
3 dinfo.setPosRootDomain(PS::F64vec(0.0, 0.0, 0.0),
4                           PS::F64vec(box.x, box.y, box.z));
```

---

#### 4.2.3.3.3 粒子群オブジェクトの初期化

次に、粒子群オブジェクトの初期化を行う必要がある。粒子群オブジェクトの初期化は、次の二文だけでよい。

Listing 25: 粒子群クラスの初期化

---

```
1 sph_system.initialize();
```

---

#### 4.2.3.3.4 ツリーオブジェクトの初期化

次に、ツリーオブジェクトの初期化を行う必要がある。ツリーオブジェクトの初期化を行う関数には、オブジェクト内部で使用する配列の大きさの初期値を渡す必要がある。初期値はローカル粒子数 (`n_loc`) 程度で十分であるため、そのようにセットする。

Listing 26: 相互作用ツリークラスの初期化

---

```
1 dens_tree.initialize(n_loc);
2 hydr_tree.initialize(n_loc);
```

---

#### 4.2.3.4 ループ

本節では、時間積分ループの中で行わなければならないことについて、解説する。

##### 4.2.3.4.1 領域分割の実行

まずは、粒子分布に基いて、領域分割を実行する。これには、領域情報オブジェクトの API `decomposeDomainAll` を用いる。

Listing 27: 領域分割の実行

---

```
1 dinfo.decomposeDomainAll(sph_system);
```

---

##### 4.2.3.4.2 粒子交換の実行

次に、領域情報に基いて、プロセス間の粒子の情報を交換する。これには、粒子群オブジェクトの API `exchangeParticle` を用いる。

Listing 28: 粒子交換の実行

---

```
1 sph_system.exchangeParticle(dinfo);
```

---

##### 4.2.3.4.3 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が終了したら、相互作用の計算を行う。これには、ツリーオブジェクトの API `calcForceAllAndWriteBack` を用いる。

## Listing 29: 相互作用計算の実行

---

```
1 dens_tree.calcForceAllAndWriteBack(CalcDensity(), sph_system, dinfo);
2 hydr_tree.calcForceAllAndWriteBack(CalcHydroForce(), sph_system, dinfo);
```

---

## 4.2.4 コンパイル

作業ディレクトリで `make` コマンドを打てばよい。Makefile としては、サンプルコードに付属の Makefile をそのまま用いる事にする。

\$ make

## 4.2.5 実行

MPIを使用しないで実行する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行すればよい。

\$ ./sph.out

もし、MPIを用いて実行する場合は、以下のコマンドを実行すればよい。

\$ MPIRUN -np NPROC ./sph.out

ここで、MPIRUNには `mpirun` や `mpiexec` などの MPI 実行プログラムが、NPROCにはプロセス数が入る。

## 4.2.6 ログファイル

計算が終了すると、`result` フォルダ下にログが出力される。

## 4.2.7 可視化

ここでは、`gnuplot` を用いた可視化の方法について解説する。`gnuplot` で対話モードに入るために、コマンドラインから `gnuplot` を起動する。

\$ gnuplot

対話モードに入ったら、`gnuplot` を用いて可視化を行う。今回は、50番目のスナップショットファイルから、横軸を粒子の `x` 座標、縦軸を密度に取ったグラフを生成する。

gnuplot> plot "result/0040.txt" u 3:9

## 5 サンプルコード

### 5.1 $N$ 体シミュレーション

$N$  体シミュレーションのサンプルコードを以下に示す。このサンプルは第 3, 4 節で用いた  $N$  体シミュレーションのサンプルコードと同じものである。これをカット&ペーストしてコンパイルすれば、正常に動作する  $N$  体シミュレーションコードを作ることができる。

Listing 30:  $N$  体シミュレーションのサンプルコード (user-defined.hpp)

```

1 #pragma once
2 class FileHeader{
3 public:
4     PS::S64 n_body;
5     PS::F64 time;
6     PS::S32 readAscii(FILE * fp) {
7         if(fscanf(fp, "%lf\n", &time) != 1) exit(1);
8         if(fscanf(fp, "%ld\n", &n_body) != 1) exit(1);
9         return n_body;
10    }
11    void writeAscii(FILE* fp) const {
12        fprintf(fp, "%e\n", time);
13        fprintf(fp, "%ld\n", n_body);
14    }
15 };
16
17 class FPGrav{
18 public:
19     PS::S64 id;
20     PS::F64 mass;
21     PS::F64vec pos;
22     PS::F64vec vel;
23     PS::F64vec acc;
24     PS::F64 pot;
25     static PS::F64 eps;
26
27     PS::F64vec getPos() const {
28         return pos;
29     }
30
31     PS::F64 getCharge() const {
32         return mass;
33     }
34
35     void copyFromFP(const FPGrav & fp){
36         mass = fp.mass;
37         pos = fp.pos;
38     }
39
40     void copyFromForce(const FPGrav & force) {
41         acc = force.acc;
42         pot = force.pot;
43     }
44

```

```

45     void clear() {
46         acc = 0.0;
47         pot = 0.0;
48     }
49
50     void writeAscii(FILE* fp) const {
51         fprintf(fp, "%ld\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\n",
52                 this->id, this->mass,
53                 this->pos.x, this->pos.y, this->pos.z,
54                 this->vel.x, this->vel.y, this->vel.z);
55     }
56
57     void readAscii(FILE* fp) {
58         if(fscanf(fp, "%ld\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
59                    &this->id, &this->mass,
60                    &this->pos.x, &this->pos.y, &this->pos.z,
61                    &this->vel.x, &this->vel.y, &this->vel.z) != 8) exit(-1)
62             ;
63     }
64
65 #ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
66
67     template <class TParticleJ>
68     void CalcGravity(const FPGrav * iptcl,
69                       const PS::S32 ni,
70                       const TParticleJ * jptcl,
71                       const PS::S32 nj,
72                       FPGrav * force) {
73         const PS::S32 nipipe = ni;
74         const PS::S32 njpipe = nj;
75         PS::F64 (*xi)[3] = (PS::F64 (*)[3])malloc(sizeof(PS::F64) * nipipe *
76                                         PS::DIMENSION);
76         PS::F64 (*ai)[3] = (PS::F64 (*)[3])malloc(sizeof(PS::F64) * nipipe *
77                                         PS::DIMENSION);
77         PS::F64 *pi      = (PS::F64 *)malloc(sizeof(PS::F64) * nipipe);
78         PS::F64 (*xj)[3] = (PS::F64 (*)[3])malloc(sizeof(PS::F64) * njpipe *
79                                         PS::DIMENSION);
79         PS::F64 *mj      = (PS::F64 *)malloc(sizeof(PS::F64) * njpipe);
80         for(PS::S32 i = 0; i < ni; i++) {
81             xi[i][0] = iptcl[i].getPos()[0];
82             xi[i][1] = iptcl[i].getPos()[1];
83             xi[i][2] = iptcl[i].getPos()[2];
84             ai[i][0] = 0.0;
85             ai[i][1] = 0.0;
86             ai[i][2] = 0.0;
87             pi[i]   = 0.0;
88         }
89         for(PS::S32 j = 0; j < nj; j++) {
90             xj[j][0] = jptcl[j].getPos()[0];
91             xj[j][1] = jptcl[j].getPos()[1];
92             xj[j][2] = jptcl[j].getPos()[2];
93             mj[j]   = jptcl[j].getCharge();
94             xj[j][0] = jptcl[j].pos[0];
95             xj[j][1] = jptcl[j].pos[1];

```

```

96         xj[j][2] = jptcl[j].pos[2];
97         mj[j]     = jptcl[j].mass;
98     }
99     PS::S32 devid = PS::Comm::getThreadNum();
100    g5_set_xmjMC(devid, 0, nj, xj, mj);
101    g5_set_nMC(devid, nj);
102    g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, ni);
103    for(PS::S32 i = 0; i < ni; i++) {
104        force[i].acc[0] += ai[i][0];
105        force[i].acc[1] += ai[i][1];
106        force[i].acc[2] += ai[i][2];
107        force[i].pot   -= pi[i];
108    }
109    free(xi);
110    free(ai);
111    free(pi);
112    free(xj);
113    free(mj);
114 }
115
116 #elif USE_PIKG_KERNEL
117 struct Epi{
118     PS::F32vec pos;
119 };
120 struct Epj{
121     PS::F32vec pos;
122     PS::F32 mass;
123 };
124 struct Force{
125     PS::F32vec acc;
126     PS::F32 pot;
127 };
128
129
130
131 #include "kernel_pikg.hpp"
132
133 template <class TParticleJ>
134 void CalcGravity(const FPGrav * ep_i,
135                   const PS::S32 n_ip,
136                   const TParticleJ * ep_j,
137                   const PS::S32 n_jp,
138                   FPGrav * force) {
139     Epi epi[n_ip];
140     Force f[n_ip];
141     for(int i=0;i<n_ip;i++){
142         epi[i].pos = (PS::F32vec)(ep_i[i].pos - ep_i[0].pos);
143
144         f[i].acc = force[i].acc;
145         f[i].pot = force[i].pot;
146     }
147     Epj epj[n_jp];
148     for(int i=0;i<n_jp;i++){
149         epj[i].pos = (PS::F32vec)(ep_j[i].pos - ep_i[0].pos);
150         epj[i].mass = ep_j[i].mass;

```

```

151 }
152 CalcGravityEpEp(FPGrav::eps*FPGrav::eps)(epi,n_ip,epj,n_jp,f);
153 for(int i=0;i<n_ip;i++){
154     force[i].acc = f[i].acc;
155     force[i].pot = f[i].pot;
156 }
157 }
158 #else
159 template <class TParticleJ>
160 void CalcGravity(const FPGrav * ep_i,
161                  const PS::S32 n_ip,
162                  const TParticleJ * ep_j,
163                  const PS::S32 n_jp,
164                  FPGrav * force) {
165     PS::F64 eps2 = FPGrav::eps * FPGrav::eps;
166     for(PS::S32 i = 0; i < n_ip; i++){
167         PS::F64vec xi = ep_i[i].getPos();
168         PS::F64vec ai = 0.0;
169         PS::F64 poti = 0.0;
170         for(PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++){
171             PS::F64vec rij = xi - ep_j[j].getPos();
172             PS::F64 r3_inv = rij * rij + eps2;
173             PS::F64 r_inv = 1.0/sqrt(r3_inv);
174             r3_inv = r_inv * r_inv;
175             r_inv *= ep_j[j].getCharge();
176             r3_inv *= r_inv;
177             ai -= r3_inv * rij;
178             poti -= r_inv;
179         }
180         force[i].acc += ai;
181         force[i].pot += poti;
182     }
183 }
184 #endif

```

Listing 31:  $N$  体シミュレーションのサンプルコード (nbody.cpp)

```

1 #include <iostream>
2 #include <fstream>
3 #include <unistd.h>
4 #include <sys/stat.h>
5 #include <particle_simulator.hpp>
6 #ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
7 #include <gp5util.h>
8 #endif
9 #ifdef ENABLE_GPU_CUDA
10 #define MULTI_WALK
11 #include "force_gpu_cuda.hpp"
12 #endif
13 #include "user-defined.hpp"
14
15 void makeColdUniformSphere(const PS::F64 mass_glb, const PS::S64 n_glb,
16                           const PS::S64 n_loc, PS::F64 *&mass, PS::F64vec *&pos, PS::F64vec *&
17                           vel,
18                           const PS::F64 eng = -0.25, const PS::S32 seed =
19                           0) {

```

```

17     assert(eng < 0.0);
18 {
19     PS::MTTS mt;
20     mt.init_genrand(0);
21     for (PS::S32 i = 0; i < n_loc; i++) {
22         mass[i] = mass_glb / n_glb;
23         const PS::F64 radius = 3.0;
24         do {
25             pos[i][0] = (2. * mt.genrand_res53() - 1.) * radius;
26             pos[i][1] = (2. * mt.genrand_res53() - 1.) * radius;
27             pos[i][2] = (2. * mt.genrand_res53() - 1.) * radius;
28         } while (pos[i] * pos[i] >= radius * radius);
29         vel[i][0] = 0.0;
30         vel[i][1] = 0.0;
31         vel[i][2] = 0.0;
32     }
33 }
34
35 PS::F64vec cm_pos = 0.0;
36 PS::F64vec cm_vel = 0.0;
37 PS::F64 cm_mass = 0.0;
38 for (PS::S32 i = 0; i < n_loc; i++) {
39     cm_pos += mass[i] * pos[i];
40     cm_vel += mass[i] * vel[i];
41     cm_mass += mass[i];
42 }
43 cm_pos /= cm_mass;
44 cm_vel /= cm_mass;
45 for (PS::S32 i = 0; i < n_loc; i++) {
46     pos[i] -= cm_pos;
47     vel[i] -= cm_vel;
48 }
49 }
50
51 template <class Tpsys>
52 void setParticlesColdUniformSphere(Tpsys &psys, const PS::S32 n_glb, PS::
53     S32 &n_loc) {
54     n_loc = n_glb;
55     psys.setNumberOfParticleLocal(n_loc);
56
57     PS::F64 *mass = new PS::F64[n_loc];
58     PS::F64vec *pos = new PS::F64vec[n_loc];
59     PS::F64vec *vel = new PS::F64vec[n_loc];
60     const PS::F64 m_tot = 1.0;
61     const PS::F64 eng = -0.25;
62     makeColdUniformSphere(m_tot, n_glb, n_loc, mass, pos, vel, eng);
63     for (PS::S32 i = 0; i < n_loc; i++) {
64         psys[i].mass = mass[i];
65         psys[i].pos = pos[i];
66         psys[i].vel = vel[i];
67         psys[i].id = i;
68     }
69     delete[] mass;
70     delete[] pos;
71     delete[] vel;

```

```

71 }
72
73 template <class Tpsys>
74 void kick(Tpsys &system, const PS::F64 dt) {
75     PS::S32 n = system.getNumberOfParticleLocal();
76     for (PS::S32 i = 0; i < n; i++) {
77         system[i].vel += system[i].acc * dt;
78     }
79 }
80
81 template <class Tpsys>
82 void drift(Tpsys &system, const PS::F64 dt) {
83     PS::S32 n = system.getNumberOfParticleLocal();
84     for (PS::S32 i = 0; i < n; i++) {
85         system[i].pos += system[i].vel * dt;
86     }
87 }
88
89 template <class Tpsys>
90 void calcEnergy(const Tpsys &system, PS::F64 &etot, PS::F64 &ekin, PS::F64
91             &epot, const bool clear = true) {
92     if (clear) {
93         etot = ekin = epot = 0.0;
94     }
95     PS::F64 etot_loc = 0.0;
96     PS::F64 ekin_loc = 0.0;
97     PS::F64 epot_loc = 0.0;
98     const PS::S32 nbody = system.getNumberOfParticleLocal();
99     for (PS::S32 i = 0; i < nbody; i++) {
100        ekin_loc += system[i].mass * system[i].vel * system[i].vel;
101        epot_loc += system[i].mass * (system[i].pot + system[i].mass /
102                                      FPGrav::eps);
103    }
104    ekin_loc *= 0.5;
105    epot_loc *= 0.5;
106    etot_loc = ekin_loc + epot_loc;
107    etot = PS::Comm::getSum(etot_loc);
108    epot = PS::Comm::getSum(epot_loc);
109    ekin = PS::Comm::getSum(ekin_loc);
110 }
111 void printHelp() {
112     std::cerr << "o:dirname of output (default: ./result)" << std::endl;
113     std::cerr << "t:theta (default: 0.5)" << std::endl;
114     std::cerr << "T:time_end (default: 10.0)" << std::endl;
115     std::cerr << "s:time_step (default: 1.0/128.0)" << std::endl;
116     std::cerr << "d:dt_diag (default: 1.0/8.0)" << std::endl;
117     std::cerr << "D:dt_snap (default: 1.0)" << std::endl;
118     std::cerr << "l:n_leaf_limit (default: 8)" << std::endl;
119     std::cerr << "n:n_group_limit (default: 64)" << std::endl;
120     std::cerr << "N:n_tot (default: 1024)" << std::endl;
121     std::cerr << "h:help" << std::endl;
122 }
123 void makeOutputDirectory(char *dir_name) {

```

```

124     struct stat st;
125     PS::S32 ret = 0;
126     if (PS::Comm::getRank() == 0) {
127         if (stat(dir_name, &st) != 0) {
128             ret = mkdir(dir_name, 0777);
129         } else {
130             ret = 0; // the directory named dir_name already exists.
131         }
132     }
133     PS::Comm::broadcast(&ret, 1);
134     if (ret == 0) {
135         if (PS::Comm::getRank() == 0) fprintf(stderr, "Directory \"%s\" is
136             successfully made.\n", dir_name);
137     } else {
138         if (PS::Comm::getRank() == 0) fprintf(stderr, "Directory \"%s\" fails to
139             be made.\n", dir_name);
140         PS::Abort();
141     }
142 PS::F64 FPGrav::eps = 1.0 / 32.0;
143
144 int main(int argc, char *argv[]) {
145     std::cout << std::setprecision(15);
146     std::cerr << std::setprecision(15);
147
148     PS::Initialize(argc, argv);
149     PS::F64 theta = 0.5;
150     PS::S32 n_leaf_limit = 8;
151     PS::S32 n_group_limit = 64;
152     PS::F64 time_end = 10.0;
153     PS::F64 dt = 1.0 / 128.0;
154     PS::F64 dt_diag = 1.0 / 8.0;
155     PS::F64 dt_snap = 1.0;
156     //PS::S32 n_steps_reuse = 4;
157     PS::S32 n_steps_reuse = 1;
158     bool clear_force = true;
159     char dir_name[1024];
160     PS::S64 n_tot = 1024;
161     PS::S32 c;
162     sprintf(dir_name, "./result");
163     opterr = 0;
164     while ((c = getopt(argc, argv, "i:o:d:D:t:T:l:n:N:h:s:")) != -1) {
165         switch (c) {
166             case 'o':
167                 strncat(dir_name, optarg, 1000);
168                 break;
169             case 't':
170                 theta = atof(optarg);
171                 std::cerr << "theta=" << theta << std::endl;
172                 break;
173             case 'T':
174                 time_end = atof(optarg);
175                 std::cerr << "time_end=" << time_end << std::endl;
176                 break;

```

```

177     case 's':
178         dt = atof(optarg);
179         std::cerr << "time_step= " << dt << std::endl;
180         break;
181     case 'd':
182         dt_diag = atof(optarg);
183         std::cerr << "dt_diag= " << dt_diag << std::endl;
184         break;
185     case 'D':
186         dt_snap = atof(optarg);
187         std::cerr << "dt_snap= " << dt_snap << std::endl;
188         break;
189     case 'l':
190         n_leaf_limit = atoi(optarg);
191         std::cerr << "n_leaf_limit= " << n_leaf_limit << std::
192             endl;
193         break;
194     case 'n':
195         n_group_limit = atoi(optarg);
196         std::cerr << "n_group_limit= " << n_group_limit << std::
197             endl;
198         break;
199     case 'N':
200         n_tot = atoi(optarg);
201         std::cerr << "n_tot= " << n_tot << std::endl;
202         break;
203     case 'h':
204         if (PS::Comm::getRank() == 0) {
205             printHelp();
206         }
207         PS::Finalize();
208         return 0;
209     default:
210         if (PS::Comm::getRank() == 0) {
211             std::cerr << "No such option! Available options are "
212                 "here." << std::endl;
213             printHelp();
214         }
215         PS::Abort();
216     }
217     makeOutputDirectory(dir_name);
218
219     std::ofstream fout_eng;
220
221     if (PS::Comm::getRank() == 0) {
222         char sout_de[1280];
223         sprintf(sout_de, "%s/t-de.dat", dir_name);
224         fout_eng.open(sout_de);
225         fprintf(stdout, "This is a sample program of N-body simulation on "
226             "FDPS!\n");
227         fprintf(stdout, "Number of processes: %d\n", PS::Comm::
228             getNumberOfProc());
229         fprintf(stdout, "Number of threads per process: %d\n", PS::Comm::

```

```

227     }
228
229     PS::ParticleSystem<FPGrav> system_grav;
230     system_grav.initialize();
231     PS::S32 n_loc = 0;
232     PS::F32 time_sys = 0.0;
233     if (PS::Comm::getRank() == 0) {
234         setParticlesColdUniformSphere(system_grav, n_tot, n_loc);
235     } else {
236         system_grav.setNumberOfParticleLocal(n_loc);
237     }
238
239     const PS::F32 coef_ema = 0.3;
240     PS::DomainInfo dinfo;
241     dinfo.initialize(coef_ema);
242     dinfo.decomposeDomainAll(system_grav);
243     system_grav.exchangeParticle(dinfo);
244     n_loc = system_grav.getNumberOfParticleLocal();
245
246 #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
247     g5_open();
248     g5_set_eps_to_all(FPGrav::eps);
249 #endif
250
251     PS::TreeForForceLong<FPGrav, FPGrav, FPGrav>::Monopole tree_grav;
252     tree_grav.initialize(n_loc, theta, n_leaf_limit, n_group_limit);
253 //tree_grav.let_usage_mode = PS::LET_USAGE_MODE::CONSTRUCT_GLOBAL_TREE
254     ;
255     tree_grav.let_usage_mode_ = PS::LET_USAGE_MODE::CONSTRUCT_LET_TREE;
256
257     /*
258     // CHECKED
259     tree_grav.setParticleLocalTree(system_grav);
260     tree_grav.makeLocalTree(dinfo);
261     tree_grav.makeGlobalTree(dinfo);
262     tree_grav.calcMomentGlobalTree();
263     tree_grav.calcForce(CalcGravity<FPGrav>, CalcGravity<PS::SPJMonopole>)
264         ;
265     for(int i=0; i<system_grav.getNumberOfParticleLocal(); i++){
266         system_grav[i].copyFromForce(tree_grav.getForce(i));
267         std::cout<<"i= "<<i<<" acc= "<<system_grav[i].acc<<std::endl;
268     }
269     PS::Finalize();
270     return 0;
271     // CHECKED
272 */
273
274 #if defined(MULTI_WALK_PTCL)
275     const PS::S32 n_walk_limit = 4;
276     const PS::S32 tag_max = 1;
277     tree_grav.calcForceAllAndWriteBackMultiWalk(DispatchKernelWithSP,
278         RetrieveKernel, tag_max, system_grav, dinfo, n_walk_limit);
279 #elif defined(ENABLE_GPU_CUDA)
280     const PS::S32 n_walk_limit = 4;

```

```

278     const PS::S32 tag_max = 1;
279     tree_grav.calcForceAllAndWriteBackMultiWalkIndex(
280         DispatchKernelWithSPIIndex, RetrieveKernel, tag_max, system_grav,
281         dinfo, n_walk_limit);
280 #else
281     tree_grav.calcForceAllAndWriteBack(CalcGravity<FPGrav>, CalcGravity<PS
282         ::SPJMonopole>, system_grav, dinfo);
282 #endif
283     PS::F64 Epot0, Ekin0, Etot0, Epot1, Ekin1, Etot1;
284     calcEnergy(system_grav, Etot0, Ekin0, Epot0);
285     PS::F64 time_diag = 0.0;
286     PS::F64 time_snap = 0.0;
287     PS::S64 n_loop = 0;
288     PS::S32 id_snap = 0;
289     while (time_sys <= time_end) {
290         /*
291         if(PS::Comm::getRank() == 0){
292             if(n_loop % 16 == 0){
293                 ((system_grav.getTimeProfile() + dinfo.getTimeProfile() +
294                     tree_grav.getTimeProfile()) / 16).dump(1);
295                 system_grav.clearTimeProfile();
296                 dinfo.clearTimeProfile();
297                 tree_grav.clearTimeProfile();
298             }
299         */
300
301         if ((time_sys >= time_snap) || ((time_sys + dt) - time_snap) > (
302             time_snap - time_sys)) {
303             char filename[1280];
304             sprintf(filename, "%s/%04d.dat", dir_name, id_snap++);
305             FileHeader header;
306             header.time = time_sys;
307             header.n_body = system_grav.getNumberOfParticleGlobal();
308             system_grav.writeParticleAscii(filename, header);
309             time_snap += dt_snap;
310         }
311
312         calcEnergy(system_grav, Etot1, Ekin1, Epot1);
313
314         if (PS::Comm::getRank() == 0) {
315             if ((time_sys >= time_diag) || ((time_sys + dt) - time_diag) >
316                 (time_diag - time_sys)) {
317                 fout_eng << time_sys << "uuu" << (Etot1 - Etot0) / Etot0
318                 << std::endl;
319                 fprintf(stdout, "time: %10.7f energy error: %e\n",
320                         time_sys, (Etot1 - Etot0) / Etot0);
321                 time_diag += dt_diag;
322             }
323         }
324
325         kick(system_grav, dt * 0.5);
326
327         time_sys += dt;
328         drift(system_grav, dt);

```

```

325
326     auto list_mode = PS::REUSE_LIST;
327     if (n_loop % n_steps_reuse == 0) {
328         dinfo.decomposeDomainAll(system_grav);
329         system_grav.exchangeParticle(dinfo);
330         list_mode = PS::MAKE_LIST_FOR_REUSE;
331     }
332 #if defined(MULTI_WALK_PTCL)
333     // multi walk
334     tree_grav.calcForceAllAndWriteBackMultiWalk(DispatchKernelWithSP,
335                                                 RetrieveKernel, tag_max, system_grav, dinfo, n_walk_limit,
336                                                 clear_force, list_mode);
337 #elif defined(ENABLE_GPU_CUDA)
338     // multi walk + index
339     tree_grav.calcForceAllAndWriteBackMultiWalkIndex(
340         DispatchKernelWithSPIndex, RetrieveKernel, tag_max,
341         system_grav, dinfo, n_walk_limit, clear_force, list_mode);
342 #else
343     tree_grav.calcForceAllAndWriteBack(CalcGravity<FPGrav>,
344                                         CalcGravity<PS::SPJMonopole>, system_grav, dinfo,
345                                         clear_force, list_mode);
346 #endif
347
348     /*
349     if(PS::Comm::getRank() == 0){
350         (dinfo.getTimeProfile() + system_grav.getTimeProfile() +
351          tree_grav.getTimeProfile()).dump(2);
352         std::cout << "*****" << std::endl;
353     }
354     dinfo.clearTimeProfile();
355     system_grav.clearTimeProfile();
356     tree_grav.clearTimeProfile();
357     */
358     kick(system_grav, dt * 0.5);
359     n_loop++;
360 }
361
362 #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
363     g5_close();
364 #endif
365
366     PS::Finalize();
367     return 0;
368 }
```

## 5.2 固定長 SPH シミュレーション

固定長 SPH シミュレーションのサンプルコードを以下に示す。このサンプルは第 3, 4 節で用いた固定長 SPH シミュレーションのサンプルコードと同じものである。これをカット&ペーストしてコンパイルすれば、正常に動作する固定長 SPH シミュレーションコードを作ることができる。

Listing 32: 固定長 SPH シミュレーションのサンプルコード

```

1 // Include FDPS header
2 #include <particle_simulator.hpp>
3 // Include the standard C++ headers
4 #include <cmath>
5 #include <cstdio>
6 #include <iostream>
7 #include <vector>
8 #include <sys/stat.h>
9
10 /* Parameters */
11 const short int Dim = 3;
12 const PS::F64 SMTH = 1.2;
13 const PS::U32 OUTPUT_INTERVAL = 10;
14 const PS::F64 C_CFL = 0.3;
15
16 /* Kernel Function */
17 const PS::F64 pi = atan(1.0) * 4.0;
18 const PS::F64 kernelSupportRadius = 2.5;
19
20 PS::F64 W(const PS::F64vec dr, const PS::F64 h){
21     const PS::F64 H = kernelSupportRadius * h;
22     const PS::F64 s = sqrt(dr * dr) / H;
23     const PS::F64 s1 = (1.0 - s < 0) ? 0 : 1.0 - s;
24     const PS::F64 s2 = (0.5 - s < 0) ? 0 : 0.5 - s;
25     PS::F64 r_value = pow(s1, 3) - 4.0 * pow(s2, 3);
26     //if # of dimension == 3
27     r_value *= 16.0 / pi / (H * H * H);
28     return r_value;
29 }
30
31 PS::F64vec gradW(const PS::F64vec dr, const PS::F64 h){
32     const PS::F64 H = kernelSupportRadius * h;
33     const PS::F64 s = sqrt(dr * dr) / H;
34     const PS::F64 s1 = (1.0 - s < 0) ? 0 : 1.0 - s;
35     const PS::F64 s2 = (0.5 - s < 0) ? 0 : 0.5 - s;
36     PS::F64 r_value = - 3.0 * pow(s1, 2) + 12.0 * pow(s2, 2);
37     //if # of dimension == 3
38     r_value *= 16.0 / pi / (H * H * H);
39     return dr * r_value / (sqrt(dr * dr) * H + 1.0e-6 * h);
40 }
41
42 /* Class Definitions */
43 /** Force Class (Result Class)
44 class Dens{
45     public:
46     PS::F64 dens;
47     PS::F64 smth;
48     void clear(){
49         dens = 0;
50     }
51 };
52 class Hydro{
53     public:
54     PS::F64vec acc;

```

```

55     PS::F64 eng_dot;
56     PS::F64 dt;
57     void clear(){
58         acc = 0;
59         eng_dot = 0;
60     }
61 };
62
63 //** Full Particle Class
64 struct FP{
65     PS::F64 mass;
66     PS::F64vec pos;
67     PS::F64vec vel;
68     PS::F64vec acc;
69     PS::F64 dens;
70     PS::F64 eng;
71     PS::F64 pres;
72     PS::F64 smth;
73     PS::F64 snds;
74     PS::F64 eng_dot;
75     PS::F64 dt;
76     PS::S64 id;
77     PS::F64vec vel_half;
78     PS::F64 eng_half;
79     void copyFromForce(const Dens& dens){
80         this->dens = dens.dens;
81     }
82     void copyFromForce(const Hydro& force){
83         this->acc = force.acc;
84         this->eng_dot = force.eng_dot;
85         this->dt = force.dt;
86     }
87     PS::F64 getCharge() const{
88         return this->mass;
89     }
90     PS::F64vec getPos() const{
91         return this->pos;
92     }
93     PS::F64 getRSearch() const{
94         return kernelSupportRadius * this->smth;
95     }
96     void setPos(const PS::F64vec& pos){
97         this->pos = pos;
98     }
99     void writeAscii(FILE* fp) const{
100         fprintf(fp,
101                 "%" PRId64 "\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t"
102                 "%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
103                 this->id, this->mass,
104                 this->pos.x, this->pos.y, this->pos.z,
105                 this->vel.x, this->vel.y, this->vel.z,
106                 this->dens, this->eng, this->pres);
107     }
108     void readAscii(FILE* fp){
109         fscanf(fp,

```

```

110         "%" SCNd64 "\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t"
111         "%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
112         &this->id, &this->mass,
113         &this->pos.x, &this->pos.y, &this->pos.z,
114         &this->vel.x, &this->vel.y, &this->vel.z,
115         &this->dens, &this->eng, &this->pres);
116     }
117     void setPressure(){
118         const PS::F64 hcr = 1.4;
119         pres = (hcr - 1.0) * dens * eng;
120         snds = sqrt(hcr * pres / dens);
121     }
122 };
123
124 /**
125  * Essential Particle Class
126  */
127 struct EP{
128     PS::F64vec pos;
129     PS::F64vec vel;
130     PS::F64 mass;
131     PS::F64 smth;
132     PS::F64 dens;
133     PS::F64 pres;
134     PS::F64 snds;
135     void copyFromFP(const FP& rp){
136         this->pos = rp.pos;
137         this->vel = rp.vel;
138         this->mass = rp.mass;
139         this->smth = rp.smth;
140         this->dens = rp.dens;
141         this->pres = rp.pres;
142         this->snds = rp.snds;
143     }
144     PS::F64vec getPos() const{
145         return this->pos;
146     }
147     PS::F64 getRSearch() const{
148         return kernelSupportRadius * this->smth;
149     }
150     void setPos(const PS::F64vec& pos){
151         this->pos = pos;
152     }
153 };
154
155 class FileHeader{
156     public:
157     PS::S32 Nbody;
158     PS::F64 time;
159     int readAscii(FILE* fp){
160         fscanf(fp, "%lf\n", &time);
161         fscanf(fp, "%d\n", &Nbody);
162         return Nbody;
163     }
164     void writeAscii(FILE* fp) const{
165         fprintf(fp, "%e\n", time);
166         fprintf(fp, "%d\n", Nbody);

```

```

165     }
166 };
167
168 struct boundary{
169     PS::F64 x, y, z;
170 };
171
172
173 /* Force Functors */
174 class CalcDensity{
175     public:
176     void operator () (const EP* const ep_i, const PS::S32 Nip,
177                         const EP* const ep_j, const PS::S32 Njp,
178                         Dens* const dens){
179         for(PS::S32 i = 0 ; i < Nip ; ++i){
180             dens[i].clear();
181             for(PS::S32 j = 0 ; j < Njp ; ++j){
182                 const PS::F64vec dr = ep_j[j].pos - ep_i[i].pos;
183                 dens[i].dens += ep_j[j].mass * W(dr, ep_i[i].smth);
184             }
185         }
186     }
187 };
188
189 class CalcHydroForce{
190     public:
191     void operator () (const EP* const ep_i, const PS::S32 Nip,
192                         const EP* const ep_j, const PS::S32 Njp,
193                         Hydro* const hydro){
194         for(PS::S32 i = 0; i < Nip ; ++ i){
195             hydro[i].clear();
196             PS::F64 v_sig_max = 0.0;
197             for(PS::S32 j = 0; j < Njp ; ++j){
198                 const PS::F64vec dr = ep_i[i].pos - ep_j[j].pos;
199                 const PS::F64vec dv = ep_i[i].vel - ep_j[j].vel;
200                 const PS::F64 w_ij = (dv * dr < 0) ? dv * dr / sqrt(dr * dr) :
201                     0;
202                 const PS::F64 v_sig = ep_i[i].sns + ep_j[j].sns - 3.0 * w_ij
203                     ;
204                 v_sig_max = std::max(v_sig_max, v_sig);
205                 const PS::F64 AV = - 0.5 * v_sig * w_ij / (0.5 * (ep_i[i].dens
206                     + ep_j[j].dens));
207                 const PS::F64vec gradW_ij = 0.5 * (gradW(dr, ep_i[i].smth) +
208                     gradW(dr, ep_j[j].smth));
209                 hydro[i].acc -= ep_j[j].mass * (ep_i[i].pres / (ep_i[i].dens
210                     * ep_i[i].dens) + ep_j[j].pres / (ep_j[j].dens *
211                     ep_j[j].dens) + AV) * gradW_ij;
212                 hydro[i].eng_dot += ep_j[j].mass * (ep_i[i].pres / (ep_i[i].dens
213                     * ep_i[i].dens) + 0.5 * AV) * dv * gradW_ij;
214             }
215             hydro[i].dt = C_CFL * 2.0 * ep_i[i].smth / v_sig_max;
216         }
217     }
218 };
219 
```

```

213 void makeOutputDirectory(char * dir_name) {
214     struct stat st;
215     PS::S32 ret;
216     if (PS::Comm::getRank() == 0) {
217         if (stat(dir_name, &st) != 0) {
218             ret = mkdir(dir_name, 0777);
219         } else {
220             ret = 0; // the directory named dir_name already exists.
221         }
222     }
223     PS::Comm::broadcast(&ret, 1);
224     if (ret == 0) {
225         if (PS::Comm::getRank() == 0)
226             fprintf(stderr, "Directory \"%s\" is successfully made.\n",
227                     dir_name);
228     } else {
229         if (PS::Comm::getRank() == 0)
230             fprintf(stderr, "Directory %s fails to be made.\n", dir_name);
231     }
232 }
233
234 void SetupIC(PS::ParticleSystem<FP>& sph_system, PS::F64 *end_time,
235               boundary *box){
236     // Set the interparticle distance and the box size
237     const PS::F64 dx = 1.0 / 128.0;
238     box->x = 1.0;
239     box->y = box->z = box->x / 8.0;
240     // Count # of particles in the computational domain
241     PS::S32 nx_left {0}, ny_left {0}, nz_left {0};
242     for(PS::F64 x = 0 ; x < box->x * 0.5 ; x += dx) nx_left++;
243     for(PS::F64 y = 0 ; y < box->y ; y += dx) ny_left++;
244     for(PS::F64 z = 0 ; z < box->z ; z += dx) nz_left++;
245     PS::S32 nx_right {0}, ny_right {0}, nz_right {0};
246     for(PS::F64 x = box->x * 0.5 ; x < box->x * 1.0 ; x += dx * 2.0)
247         nx_right++;
248     for(PS::F64 y = 0 ; y < box->y ; y += dx) ny_right++;
249     for(PS::F64 z = 0 ; z < box->z ; z += dx) nz_right++;
250     const PS::S64 n_ptcl_glb = (nx_left * ny_left * nz_left)
251                               + (nx_right * ny_right * nz_right);
252     // Set # of local particles
253     const PS::S32 n_proc = PS::Comm::getNumberOfProc();
254     const PS::S32 my_rank = PS::Comm::getRank();
255     const PS::S32 n_ptcl_quot = n_ptcl_glb / n_proc; // quotient
256     const PS::S32 n_ptcl_rem = n_ptcl_glb % n_proc; // remainder
257     if (my_rank == 0) {
258         std::cout << "n_ptcl_glb=" << n_ptcl_glb << std::endl;
259         std::cout << "n_ptcl_quot=" << n_ptcl_quot << std::endl;
260         std::cout << "n_ptcl_rem=" << n_ptcl_rem << std::endl;
261     }
262     const PS::S32 n_ptcl_loc = n_ptcl_quot + ((my_rank < n_ptcl_rem) ? 1 :
263                                               0);
264     sph_system.setNumberOfParticleLocal(n_ptcl_loc);
265     const PS::S64 i_head = n_ptcl_quot * my_rank
266                           + ((my_rank > (n_ptcl_rem-1)) ? n_ptcl_rem :

```

```

                                my_rank);
264 const PS::S64 i_tail = i_head + n_ptcl_loc;
265 for (PS::S32 rank = 0; rank < n_proc; rank++) {
266     if (rank == my_rank) {
267         std::cout << "my_rank=" << my_rank
268             << ",n_ptcl_loc=" << n_ptcl_loc
269             << ",i_head=" << i_head
270             << ",i_tail=" << i_tail
271             << std::endl;
272     }
273     PS::Comm::barrier();
274 }
275 // Set local particles
276 const PS::F64 sv = (box->x * box->y * box->z)
277             / static_cast<PS::F64>(n_ptcl_glb);
278 PS::S64 i = 0;
279 for(PS::F64 x = 0 ; x < box->x * 0.5 ; x += dx){
280     for(PS::F64 y = 0 ; y < box->y ; y += dx){
281         for(PS::F64 z = 0 ; z < box->z ; z += dx){
282             if (i_head <= i && i < i_tail) {
283                 const PS::S32 ii = i - i_head;
284                 sph_system[ii].pos.x = x;
285                 sph_system[ii].pos.y = y;
286                 sph_system[ii].pos.z = z;
287                 sph_system[ii].dens = 1.0;
288                 sph_system[ii].mass = 0.75 * sv;
289                 sph_system[ii].eng = 2.5;
290                 sph_system[ii].id = i;
291                 sph_system[ii].smth = 0.012;
292             }
293             i++;
294         }
295     }
296 }
297 for(PS::F64 x = box->x * 0.5 ; x < box->x * 1.0 ; x += dx * 2.0){
298     for(PS::F64 y = 0 ; y < box->y ; y += dx){
299         for(PS::F64 z = 0 ; z < box->z ; z += dx){
300             if(i_head <= i && i < i_tail) {
301                 const PS::S32 ii = i - i_head;
302                 sph_system[ii].pos.x = x;
303                 sph_system[ii].pos.y = y;
304                 sph_system[ii].pos.z = z;
305                 sph_system[ii].dens = 0.5;
306                 sph_system[ii].mass = 0.75 * sv;
307                 sph_system[ii].eng = 2.5;
308                 sph_system[ii].id = i;
309                 sph_system[ii].smth = 0.012;
310             }
311             i++;
312         }
313     }
314 }
315 assert(i == n_ptcl_glb);
316 // Set the end time
317 *end_time = 0.12;

```

```

318 // Fin.
319 if (my_rank == 0) {
320     std::cout << "SetupIC() is completed." << std::endl;
321 }
322 }
323
324 void Initialize(PS::ParticleSystem<FP>& sph_system){
325     for(PS::S32 i = 0 ; i < sph_system.getNumberOfParticleLocal() ; ++ i){
326         sph_system[i].setPressure();
327     }
328 }
329
330 PS::F64 getTimeStepGlobal(const PS::ParticleSystem<FP>& sph_system){
331     PS::F64 dt = 1.0e+30; //set VERY LARGE VALUE
332     for(PS::S32 i = 0 ; i < sph_system.getNumberOfParticleLocal() ; ++ i){
333         dt = std::min(dt, sph_system[i].dt);
334     }
335     return PS::Comm::getMinValue(dt);
336 }
337
338 void InitialKick(PS::ParticleSystem<FP>& sph_system, const PS::F64 dt){
339     for(PS::S32 i = 0 ; i < sph_system.getNumberOfParticleLocal() ; ++ i){
340         sph_system[i].vel_half = sph_system[i].vel + 0.5 * dt * sph_system[i].acc;
341         sph_system[i].eng_half = sph_system[i].eng + 0.5 * dt * sph_system[i].eng_dot;
342     }
343 }
344
345 void FullDrift(PS::ParticleSystem<FP>& sph_system, const PS::F64 dt){
346     // time becomes t + dt;
347     for(PS::S32 i = 0 ; i < sph_system.getNumberOfParticleLocal() ; ++ i){
348         sph_system[i].pos += dt * sph_system[i].vel_half;
349     }
350 }
351
352 void Predict(PS::ParticleSystem<FP>& sph_system, const PS::F64 dt){
353     for(PS::S32 i = 0 ; i < sph_system.getNumberOfParticleLocal() ; ++ i){
354         sph_system[i].vel += dt * sph_system[i].acc;
355         sph_system[i].eng += dt * sph_system[i].eng_dot;
356     }
357 }
358
359 void FinalKick(PS::ParticleSystem<FP>& sph_system, const PS::F64 dt){
360     for(PS::S32 i = 0 ; i < sph_system.getNumberOfParticleLocal() ; ++ i){
361         sph_system[i].vel = sph_system[i].vel_half + 0.5 * dt * sph_system[i].acc;
362         sph_system[i].eng = sph_system[i].eng_half + 0.5 * dt * sph_system[i].eng_dot;
363     }
364 }
365
366 void setPressure(PS::ParticleSystem<FP>& sph_system){
367     for(PS::S32 i = 0 ; i < sph_system.getNumberOfParticleLocal() ; ++ i){
368         sph_system[i].setPressure();

```

```

369     }
370 }
371
372 inline std::tuple<PS::F64, PS::F64vec> GetConservativeVariables(const PS::
373     ParticleSystem<FP>& sph_system){
374     PS::F64vec Mom=0.0; // total momentum
375     PS::F64 Eng=0.0; // total enegry
376     for(PS::S32 i = 0; i < sph_system.getNumberOfParticleLocal(); ++ i){
377         Mom += sph_system[i].vel * sph_system[i].mass;
378         Eng += (sph_system[i].eng + 0.5 * sph_system[i].vel * sph_system[i].
379             vel)
380             * sph_system[i].mass;
381     }
382     Eng = PS::Comm::getSum(Eng);
383     Mom = PS::Comm::getSum(Mom);
384     return std::make_tuple(Eng, Mom);
385 }
386
387 /*
388 void CheckConservativeVariables(const PS::ParticleSystem<FP>& sph_system){
389     PS::F64vec Mom=0.0; // total momentum
390     PS::F64 Eng=0.0; // total enegry
391     for(PS::S32 i = 0; i < sph_system.getNumberOfParticleLocal(); ++ i){
392         Mom += sph_system[i].vel * sph_system[i].mass;
393         Eng += (sph_system[i].eng + 0.5 * sph_system[i].vel * sph_system[i].
394             vel)
395             * sph_system[i].mass;
396     }
397     Eng = PS::Comm::getSum(Eng);
398     Mom = PS::Comm::getSum(Mom);
399     if(PS::Comm::getRank() == 0){
400         printf("%.16e\n", Eng);
401         printf("%.16e\n", Mom.x);
402         printf("%.16e\n", Mom.y);
403         printf("%.16e\n", Mom.z);
404     }
405 }
406
407 int main(int argc, char* argv[]){
408     // Initialize FDPS
409     PS::Initialize(argc, argv);
410     // Make a directory
411     char dir_name[1024];
412     sprintf(dir_name, "./result");
413     makeOutputDirectory(dir_name);
414     // Display # of MPI processes and threads
415     const PS::S32 n_proc = PS::Comm::getNumberOfProc();
416     const PS::S32 my_rank = PS::Comm::getRank();
417     const PS::S32 n_thread = PS::Comm::getNumberOfThread();
418     if (my_rank == 0) {
419         std::cout << "======" << std::
420             endl
421             << "This is a sample program of "
422                 endl

```

```

419             << "Smoothed Particle Hydrodynamics on FDPS!" << std::
420                 endl
421             << "#of processes is" << n_proc << std::
422                 endl
423             << "#of thread is" << n_thread << std::
424                 endl;
425         }
426         // Make an instance of ParticleSystem and initialize it
427         PS::ParticleSystem<FP> sph_system;
428         sph_system.initialize();
429         // Define local variables
430         PS::F64 dt, end_time;
431         boundary box;
432         // Make an initial condition and initialize the particle system
433         SetupIC(sph_system, &end_time, &box);
434         Initialize(sph_system);
435         // Make an instance of DomainInfo and initialize it
436         PS::DomainInfo dinfo;
437         dinfo.initialize();
438         // Set the boundary condition
439         dinfo.setBoundaryCondition(PS::BOUNDARY_CONDITION_PERIODIC_XYZ);
440         dinfo.setPosRootDomain(PS::F64vec(0.0, 0.0, 0.0),
441                             PS::F64vec(box.x, box.y, box.z));
442         // Perform domain decomposition
443         dinfo.decomposeDomainAll(sph_system);
444         // Exchange the SPH particles between the (MPI) processes
445         sph_system.exchangeParticle(dinfo);
446         PS::S32 n_loc = sph_system.getNumberOfParticleLocal();
447         // Make two tree structures
448         // (one is for the density calculation and
449         // another is for the force calculation.)
450         PS::TreeForForceShort<Dens, EP, EP>::Gather dens_tree;
451         dens_tree.initialize(n_loc);
452
453         PS::TreeForForceShort<Hydro, EP, EP>::Symmetry hydr_tree;
454         hydr_tree.initialize(n_loc);
455         // Compute density, pressure, acceleration due to pressure gradient
456         dens_tree.calcForceAllAndWriteBack(CalcDensity(), sph_system, dinfo);
457         setPressure(sph_system);
458         hydr_tree.calcForceAllAndWriteBack(CalcHydroForce(), sph_system, dinfo)
459         ;
460         // Get timestep
461         dt = getTimeStepGlobal(sph_system);
462         // Main loop for time integration
463         auto [eng0, mom0] = GetConservativeVariables(sph_system);
464         PS::S32 step = 0;
465         for(PS::F64 time = 0 ; time < end_time ; time += dt, ++ step){
466             // Leap frog: Initial Kick & Full Drift
467             InitialKick(sph_system, dt);
468             FullDrift(sph_system, dt);
469             // Adjust the positions of the SPH particles that run over
470             // the computational boundaries.
471             sph_system.adjustPositionIntoRootDomain(dinfo);

```

```

469     // Leap frog: Predict
470     Predict(sph_system, dt);
471     // Perform domain decomposition again
472     dinfo.decomposeDomainAll(sph_system);
473     // Exchange the SPH particles between the (MPI) processes
474     sph_system.exchangeParticle(dinfo);
475     // Compute density, pressure, acceleration due to pressure gradient
476     dens_tree.calcForceAllAndWriteBack(CalcDensity(), sph_system, dinfo)
477     ;
478     setPressure(sph_system);
479     hydr_tree.calcForceAllAndWriteBack(CalcHydroForce(), sph_system,
480                                         dinfo);
481     // Get a new timestep
482     dt = getTimeStepGlobal(sph_system);
483     // Leap frog: Final Kick
484     FinalKick(sph_system, dt);
485     // Output result files
486     if(step % OUTPUT_INTERVAL == 0){
487         FileHeader header;
488         header.time = time;
489         header.Nbody = sph_system.getNumberOfParticleGlobal();
490         char filename[256];
491         sprintf(filename, "result/%04d.txt", step);
492         sph_system.writeParticleAscii(filename, header);
493         if (my_rank == 0){
494             std::cout << "===== " << std::endl;
495             std::cout << "output" << filename << "." << std::endl;
496             std::cout << "===== " << std::endl;
497         }
498         // Output information to STDOUT
499         if (my_rank == 0){
500             std::cout << "===== " << std::endl;
501             std::cout << "time" << time << std::endl;
502             std::cout << "step" << step << std::endl;
503             std::cout << "===== " << std::endl;
504             auto [eng1, mom1] = GetConservativeVariables(sph_system);
505             std::cout << "relative energy err:" << (eng1 - eng0)/ eng0 << std::endl;
506             std::cout << "absolute momentum err:" << (mom1 - mom0) << std::endl;
507             //CheckConservativeVariables(sph_system);
508         }
509         // Finalize FDPS
510         PS::Finalize();
511         return 0;
512     }

```

## 6 拡張機能の解説

### 6.1 P<sup>3</sup>M コード

本節では、FDPS の拡張機能 Particle Mesh (以下、PM と省略する) の使用方法について、P<sup>3</sup>M(Particle-Particle-Particle-Mesh) 法のサンプルコードを用いて解説を行う。このサンプルコードでは、塩化ナトリウム (NaCl) 結晶の系全体の結晶エネルギーを P<sup>3</sup>M 法で計算し、結果を解析解と比較する。P<sup>3</sup>M 法では、力、及び、ポテンシャルエネルギーの計算を、Particle-Particle(PP) パートと Particle-Mesh(PM) パートに split して行われる。このサンプルコードでは PP パートを FDPS 標準機能を用いて計算し、PM パートを FDPS 拡張機能を用いて計算する。なお、拡張機能 PM の仕様の詳細は、仕様書 9.2 節で説明されているので、そちらも参照されたい。

#### 6.1.1 サンプルコードの場所と作業ディレクトリ

サンプルコードの場所は、\$(FDPS)/sample/c++/p3m である。まずは、そこに移動する。

```
$ cd $(FDPS)/sample/c++/p3m
```

サンプルコードは main.cpp と GCC 用の Makefile である Makefile からなる。

#### 6.1.2 ユーザー定義型

本節では、FDPS の機能を用いて P<sup>3</sup>M 法の計算を行うにあたって、ユーザーが記述しなければならないクラスについて記述する。

##### 6.1.2.1 FullParticle 型

ユーザーは FullParticle 型を記述しなければならない。Listing 33 に、サンプルコードの FullParticle 型を示す。FullParticle 型には、計算を行うにあたって、粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている必要がある。また、以下のメンバ関数を持たせる必要がある：

- getCharge() — FDPS が粒子の電荷量を取得するのに必要
- getChargeParticleMesh() — FDPS の PM モジュールが粒子の電荷量を取得するために必要
- getPos() — FDPS が粒子座標を取得するのに必要
- getRSearch() — FDPS がカットオフ半径を取得するのに必要
- setPos() — FDPS が粒子の座標を書き込むのに必要
- copyFromForce() — Force 型から結果をコピーするのに必要なメンバ関数
- copyFromForceParticleMesh() — PM モジュールが力の計算結果を書き込むために必要

なお、このサンプルコードでは `copyFromForce()` と `copyFromForceParticleMesh()` が空関数になっている。これはサンプルコードでは後述する API `getForce()` 等を用いて、明示的に結果を `Force` 型から `FullParticle` 型にコピーする実装になっているためである。

Listing 33: FullParticle 型

---

```

1 class Nbody_FP
2 {
3     public:
4         PS::S64 id;
5         PS::F64 m;
6         PS::F64 rc;
7         PS::F64vec x;
8         PS::F64vec v, v_half;
9         PS::F64vec agrv;
10        PS::F64 pot;
11        // Member functions required by FDPS
12        PS::F64 getCharge() const {
13            return m;
14        };
15        PS::F64 getChargeParticleMesh() const {
16            return m;
17        };
18        PS::F64vec getPos() const {
19            return x;
20        };
21        PS::F64 getRSearch() const {
22            return rc;
23        };
24        void setPos(const PS::F64vec& x) {
25            this->x = x;
26        };
27        void copyFromForce(const Nbody_PP_Results& result) {};
28        void copyFromForceParticleMesh(const PS::F64 apm) {};
29    };

```

---

### 6.1.2.2 EssentialParticleI 型

ユーザーは `EssentialParticleI` 型を記述しなければならない。`EssentialParticleI` 型には、PP パートの Force 計算を行う際、 $i$  粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。また、本チュートリアル中では、`EssentialParticleJ` 型も兼ねているため、 $j$  粒子が持っているべき全ての物理量もメンバ変数として持っている必要がある。Listing 34 に、サンプルコードの `EssentialParticleI` 型を示す。

この `EssentialParticleI` 型には前述した `FullParticle` 型から、値をコピーするのに必要なメンバ関数 `copyFromFP()` を持つ必要がある。その他、粒子の電荷量を返す関数である `getCharge()`、粒子座標を返す関数である `getPos()`、粒子のカットオフ半径を返す関数である `getRSearch()`、粒子の座標を書き込む関数である `setPos()` が必要になる。

Listing 34: EssentialParticleI 型

---

```

1 class Nbody_EP

```

---

```

2 {
3     public:
4         PS::S64 id;
5         PS::F64 m;
6         PS::F64 rc;
7         PS::F64vec x;
8         // Member functions required by FDPS
9         PS::F64 getCharge() const {
10             return m;
11         };
12         PS::F64vec getPos() const {
13             return x;
14         };
15         PS::F64 getRSearch() const {
16             return rc;
17         };
18         void setPos(const PS::F64vec& x) {
19             this->x = x;
20         };
21         void copyFromFP(const Nbody_FP& FP) {
22             id = FP.id;
23             m = FP.m;
24             rc = FP.rc;
25             x = FP.x;
26         };
27 }

```

---

### 6.1.2.3 Force型

ユーザーは Force 型を記述しなければならない。Force 型は、PP パートの Force の計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。本サンプルコードの Force 型を Listing 35 に示す。このサンプルコードでは、Force は Coulomb 相互作用計算のみであるため、Force 型が 1 つ用意されている。また、積算対象のメンバ変数を 0 ないし初期値に設定するための関数 clear() が必要になる。

Listing 35: Force 型

```

1 class Nbody_PP_Results
2 {
3     public:
4         PS::F64 pot;
5         PS::F64vec agrv;
6         void clear() {
7             pot = 0.0;
8             agrv = 0.0;
9         }
10 }

```

---

### 6.1.2.4 相互作用関数 calcForceEpEp

ユーザーは相互作用関数 calcForceEpEp を記述しなければならない。calcForceEpEp には、PP パートの Force の計算の具体的な内容を書く必要がある。calcForceEpEp は、void 関数或いは、ファンクタ (関数オブジェクト) として実装されなければならない。引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。本サンプルコードの calcForceEpEp の実装を Listing 36 に示す。このサンプルコードでは、ファンクタ (関数オブジェクト) を用いて実装している。

Listing 36: 相互作用関数 calcForceEpEp

---

```

1 class Calc_force_ep_ep{
2     public:
3         void operator () (const Nbody_EP* const ep_i,
4                             const PS::S32 Nip,
5                             const Nbody_EP* const ep_j,
6                             const PS::S32 Njp,
7                             Nbody_PP_Results* const result) {
8             for (PS::S32 i=0; i<Nip; i++) {
9                 for (PS::S32 j=0; j<Njp; j++) {
10                     PS::F64vec dx = ep_i[i].x - ep_j[j].x;
11                     PS::F64 rij = std::sqrt(dx * dx);
12                     if ((ep_i[i].id == ep_j[j].id) && (rij == 0.0)) continue;
13                     PS::F64 rinv = 1.0/rij;
14                     PS::F64 rinv3 = rinv*rinv*rinv;
15                     PS::F64 xi = 2.0*rij/ep_i[i].rc;
16                     result[i].pot += ep_j[j].m * S2_pcut(xi) * rinv;
17                     result[i].agrv += ep_j[j].m * S2_fcut(xi) * rinv3 * dx;
18                 }
19                 /* Self-interaction term
20                 result[i].pot -= ep_i[i].m * (208.0/(70.0*ep_i[i].rc));
21             }
22         };
23     };
24 };

```

---

$P^3M$  法の PP パートは、(距離に関する) カットオフ付きの 2 体相互作用である。そのため、ポテンシャルと加速度の計算にカットオフ関数 (`S2_pcut()`, `S2_fcut()`) が含まれていることに注意されたい。ここで、各カットオフ関数は、粒子の形状関数  $S(r)$  が  $S2(r)$  のときのカットオフ関数である必要がある。ここで、 $S2(r)$  は Hockney & Eastwood (1988) の式 (8.3) で定義される形状関数で、以下の形を持つ:

$$S2(r) = \begin{cases} \frac{48}{\pi a^4} \left( \frac{a}{2} - r \right) & r < a/2, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 $r$  は粒子からの距離、 $a$  は形状関数のスケール長である。粒子の電荷量を  $q$  とすれば、この粒子が作る電荷密度分布  $\rho(r)$  は  $\rho(r) = q S2(r)$  と表現される。これは  $r$  に関して線形な密度分布を仮定していることを意味する。PP パートのカットオフ関数が  $S2(r)$  を仮定したものでなければならない理由は、PM パートのカットオフ関数が S2 型形状関数を仮定

して実装されているためである (PM パートと PP パートのカットオフ関数は同じ形状関数に基づく必要がある)。

カットオフ関数はユーザが定義する必要がある。サンプルコードの冒頭に S2\_pcut() と S2\_fcut() の実装例がある。これらの関数では、Hockney & Eastwood (1988) の式 (8-72),(8-75) が使用されている。カットオフ関数は、PP 相互作用が以下の形となるように定義されている:

$$\Phi_{\text{PP}}(\mathbf{mr}) = \frac{m}{|\mathbf{mr} - \mathbf{mr}'|} \text{S2\_pcut}(\xi) \quad (2)$$

$$\mathbf{m}f_{\text{PP}}(\mathbf{mr}) = \frac{m(\mathbf{mr} - \mathbf{mr}')}{|\mathbf{mr} - \mathbf{mr}'|^3} \text{S2\_fcut}(\xi) \quad (3)$$

ここで、 $\xi = 2|\mathbf{mr} - \mathbf{mr}'|/a$  である。本サンプルコードでは  $a$  を変数  $rc$  で表現している。

Hockney & Eastwood (1988) の式 (8-75) を見ると、 $r = 0$  のとき、メッシュポテンシャル  $\phi^m$  が次の有限値を持つことがわかる (ここで、 $1/4\pi\varepsilon_0$  の因子は省略した):

$$\phi^m(0) = \frac{208}{70a} \quad (4)$$

この項はサンプルコードの  $i$  粒子のループの最後で考慮されている:

---

```
1 result[i].pot -= ep_i[i].m * (208.0/(70.0*ep_i[i].rc));
```

---

この項を考慮しないと解析解と一致しないことに注意する必要がある。

### 6.1.2.5 相互作用関数 calcForceEpSp

ユーザーは相互作用関数 calcForceEpSp を記述しなければならない<sup>注 2)</sup>。calcForceEpSp には、粒子-超粒子間相互作用計算の具体的な内容を書く必要がある。calcForceEpSp は、void 関数 或いは、ファンクタ (関数オブジェクト) として実装されなければならない。引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、超粒子型の配列、超粒子型の個数、Force 型の配列である。本サンプルコードの calcForceEpSp の実装を Listing 37 に示す。このサンプルコードでは、ファンクタ (関数オブジェクト) を用いて実装している。

Listing 37: 相互作用関数 calcForceEpSp

---

```
1 class Calc_force_ep_sp {
2     public:
3         void operator () (const Nbody_EP* const ep_i,
4                             const PS::S32 Nip,
5                             const PS::SPJMonopoleCutoff* const ep_j,
6                             const PS::S32 Njp,
7                             Nbody_PP_Results* const result) {
8             for (PS::S32 i=0; i<Nip; i++) {
9                 for (PS::S32 j=0; j<Njp; j++) {
```

<sup>注 2)</sup>冒頭で述べたように、本サンプルコードでは相互作用計算に P<sup>3</sup>M 法を用いる。FDPS の枠組み内で、これを実現するため、後述するように、見込み角の基準値  $\theta$  を 0 に指定して相互作用計算を行う。このため、粒子-超粒子相互作用は発生しないはずである。しかしながら、API

calcForceAllAndWriteBack に、粒子-超粒子間相互作用を計算する関数のアドレスを渡す必要があるため、相互作用関数 calcForceEpSp を定義する必要がある。

```

10         PS::F64vec dx = ep_i[i].x - ep_j[j].pos;
11         PS::F64 rij = std::sqrt(dx * dx);
12         PS::F64 rinv = 1.0/rij;
13         PS::F64 rinv3 = rinv*rinv*rinv;
14         PS::F64 xi = 2.0*rij/ep_i[i].rc;
15         result[i].pot += ep_j[j].mass * S2_pcut(xi) * rinv;
16         result[i].agrv += ep_j[j].mass * S2_fcut(xi) * rinv3 * dx;
17     }
18 }
19 }
20 };
21 };

```

---

### 6.1.3 プログラム本体

本節では、サンプルコード本体について解説を行う。詳細な説明に入る前に、サンプルコードの内容と全体構造について説明を与える。[6.1](#) 節で述べたように、このサンプルコードでは NaCl 結晶の結晶エネルギーを P<sup>3</sup>M 法によって計算し解析解と比較する。NaCl 結晶は一様格子状に並んだ粒子として表現される。Na と Cl は互い違いに並んでおり、Na に対応する粒子は正の電荷を、Cl に対応する粒子は負の電荷を持っている。この粒子で表現された結晶を、大きさが [0, 1)<sup>3</sup> の周期境界ボックスの中に配置し、結晶エネルギーを計算する。結晶エネルギーの計算精度は周期境界ボックスの中の粒子数や粒子の配置に依存するはずなので、サンプルコードでは、これらを変えてエネルギーの相対誤差を調べ、結果をファイルに出力する内容となっている。

コードの全体構造は以下のようになっている：

- (1) FDPS で使用するオブジェクトの生成と初期化
- (2) 指定された粒子数と配置の結晶を生成（メイン関数  
の NaCl\_IC() )
- (3) 各粒子のポテンシャルエネルギーを P<sup>3</sup>M 法で計算（メイン関数の Nbody\_objs.calc\_gravity() )
- (4) 系全体のエネルギーを計算し、解析解と比較（メイン関数の calc\_energy\_error() )
- (5) (2) ~ (4) を繰り返す

以下で、個々について詳しく説明を行う。

### 6.1.4 ヘッダファイルのインクルード

拡張機能 PM を FDPS 標準機能とともに使用するため、particle\_simulator.hpp に加え、particle\_mesh.hpp と param\_fdfs.h をインクルードする。これに加え、このサンプルコードでは拡張機能の非公開定数 CUTOFF\_RADIUS を参照するため、param.h もインクルードしている。

Listing 38: Include FDPS

---

```

1 #include <particle_simulator.hpp>
2 #include <particle_mesh.hpp>
3 #include <param.h>
4 #include <param_fdps.h>

```

---

#### 6.1.4.1 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メイン関数に記述する。

Listing 39: FDPS の開始

---

```

1 PS::Initialize(argc, argv);

```

---

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メイン関数の最後に次のように記述する。

Listing 40: FDPS の終了

---

```

1 PS::Finalize();

```

---

#### 6.1.4.2 オブジェクトの生成と初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

##### 6.1.4.2.1 オブジェクトの生成

$P^3M$  法の計算では、粒子群クラス、領域クラスに加え、PP パートの計算用の tree を 1 本、さらに PM パートの計算に必要な ParticleMesh オブジェクトの生成が必要である。

サンプルコードでは、これらのオブジェクトを `Nbody_Objects` クラスにまとめている。以下にそのコードを記す。

Listing 41: `Nbody_Objects` クラス

---

```

1 class Nbody_Objects {
2     public:
3         PS::ParticleSystem<Nbody_FP> system;
4         PS::DomainInfo dinfo;
5         PS::TreeForForceLong<Nbody_PP_Results, Nbody_EP, Nbody_EP>::
6             MonopoleWithCutoff pp_tree;
7         PS::PM::ParticleMesh pm;
7 }

```

---

サンプルコードでは、メイン関数のローカル変数として `Nbody_Objects` オブジェクトを 1 個生成している:

Listing 42: `Nbody_Objects` クラスのオブジェクト生成

---

```

1 Nbody_Objects Nbody_objs;

```

---

### 6.1.4.2.2 オブジェクトの初期化

ユーザーはオブジェクトを生成したら、そのオブジェクトを使用する前に、初期化を行う必要がある。以下で、各オブジェクトの初期化の仕方について解説を行う。

#### (i) 粒子群オブジェクトの初期化 粒子群オブジェクトの初期化は、以下のように行う:

Listing 43: 粒子群オブジェクトの初期化

---

```
1 Nbody_objs.system.initialize();
```

---

サンプルコードではメイン関数の冒頭で呼び出されている。

#### (ii) 領域オブジェクトの初期化 領域オブジェクトの初期化は、以下のように行う:

Listing 44: 領域オブジェクトの初期化

---

```
1 Nbody_objs.dinfo.initialize();
```

---

サンプルコードではメイン関数の冒頭で呼び出されている。

初期化が完了した後、領域オブジェクトには境界条件と境界の大きさをセットする必要がある。サンプルコードでは、この作業は粒子分布を決定する void 関数

NaCl\_IC() の中に実装されている:

---

```
1 dinfo.setBoundaryCondition(PS::BOUNDARY_CONDITION_PERIODIC_XYZ);
2 dinfo.setPosRootDomain(PS::F64vec(0.0,0.0,0.0),
3                         PS::F64vec(1.0,1.0,1.0));
```

---

#### (iii) ツリーオブジェクトの初期化 相互作用ツリーオブジェクトの初期化も、API initialize を使って、以下のように行う:

Listing 45: ツリーオブジェクトの初期化

---

```
1 void init_tree() {
2     PS::S32 numPtclLobal = system.getNumberOfParticleLobal();
3     PS::U64 ntot = 3 * numPtclLobal;
4     pp_tree.initialize(ntot,0.0);
5 }
```

---

ツリーオブジェクトの API

initialize には引数として、大雑把な粒子数を渡す必要がある。これは API の第 1 引数として指定する。上記の例では、API が呼ばれた時点でのローカル粒子数の 3 倍の値がセットされるようになっている。一方、API の第 2 引数は省略可能引数で、tree 法で力を計算するときの opening angle criterion

$\theta$  を指定する。本サンプルコードでは PP パートの計算で粒子-超粒子相互作用を発生させないようにするために、 $\theta = 0$  を指定している。

本サンプルコードでは、ツリーオブジェクトの初期化は Nbody\_objs.init\_tree() を通して行っている（メイン関数を参照のこと）。

---

```

1 if (is_tree_initialized == false) {
2     Nbody_objs.init_tree();
3     is_tree_initialized = true;
4 }
```

---

ここで、初期化はプログラム中で1回だけ行う必要があるため、上記のようなif文の処理が必要となる。

(iv) ParticleMesh オブジェクトの初期化 特に明示的に初期化を行う必要はない。

#### 6.1.4.3 粒子分布の生成

本節では、粒子分布を生成するvoid関数NaCl\_ICの動作とその中で呼ばれているFDPSのAPIについて解説を行う。このvoid関数は、周期境界ボックスの1次元あたりの粒子数と、原点(0,0,0)に最も近い粒子の座標を引数として、3次元粒子分布を生成する。サンプルコードでは、これらのパラメータはクラスCrystal\_ParametersのオブジェクトNaCl\_paramsを使って渡されている：

---

```

1 class Crystal_Parameters
2 {
3     public:
4         PS::S32 numPtcl_per_side;
5         PS::F64vec pos_vertex;
6     };
7 /* In main function */
8 Crystal_Parameters NaCl_params;
9 NaCl_IC(Nbody_objs.system,
10         Nbody_objs.dinfo,
11         NaCl_params);
```

---

NaCl\_ICの前半部分において、渡されたパラメータを使って粒子分布を生成している。この結晶の系全体のエネルギーは

$$E = -\frac{N\alpha m^2}{R_0} \quad (5)$$

と解析的に書ける。ここで、 $N$ は分子の総数(原子の数は $2N$ 個)、 $m$ は粒子の電荷量、 $R_0$ は最隣接原子間距離、 $\alpha$ はマーデリング(Madelung)定数である。NaCl結晶の場合、 $\alpha \approx 1.747565$ である(例えば、キッテル著「固体物理学入門(第8版)」を参照せよ)。計算結果をこの解析解と比較するとき、系全体のエネルギーが粒子数に依存しては不便である。そこで、サンプルコードでは、系全体のエネルギーが粒子数に依存しないように、粒子の電荷量 $m$ を

$$\frac{2Nm^2}{R_0} = 1 \quad (6)$$

となるようにスケールしていることに注意されたい。

粒子分布の生成後、FDPSのAPIを使って、領域分割と粒子交換を行っている。以下で、これらのAPIについて解説する。

#### 6.1.4.3.1 領域分割の実行

粒子分布に基いて領域分割を実行するには、領域オブジェクトの API `decomposeDomainAll` を使用する:

Listing 46: 領域分割の実行

---

```
1 dinfo.decomposeDomainAll(system);
```

---

ここで、粒子分布の情報を領域オブジェクトに与えるため、引数に粒子群オブジェクトが渡されていることに注意されたい。

#### 6.1.4.3.2 粒子交換の実行

領域情報を基いてプロセス間の粒子の情報を交換するには、粒子群オブジェクトの API `exchangeParticle` を使用する:

Listing 47: 粒子交換の実行

---

```
1 system.exchangeParticle(dinfo);
```

---

ここで領域情報を粒子群オブジェクトに与えるため、引数に領域オブジェクトが渡されていることに注意する。

#### 6.1.4.4 相互作用計算の実行

粒子分布を決定し、領域分割・粒子交換が終了したら、相互作用の計算を行う。サンプルコードでは、この作業をメイン関数で行っている:

Listing 48: 相互作用計算の実行

---

```
1 Nbody_objs.calc_gravity();
```

---

`Nbody_objs.calc_gravity()` の中身は以下のようになっており、(i) ポテンシャルエネルギーと加速度の 0 クリア、(ii) PM パートの計算、(iii) PP パートの計算から構成される:

Listing 49: 相互作用計算の中身

---

```
1 void calc_gravity() {
2     /* Local variables
3     PS::S32 numPtclLocal = system.getNumberOfParticleLocal();
4
5     /* Reset potential and accelerations
6     for (PS::S32 i=0; i<numPtclLocal; i++) {
7         system[i].pot = 0.0;
8         system[i].agrv = 0.0;
9     }
10
11 //=====
12 /* [1] PM part
13 //=====
14 pm.setDomainInfoParticleMesh(dinfo);
```

---

```

15 pm.setParticleParticleMesh(system);
16 pm.calcMeshForceOnly();
17 for (PS::S32 i=0; i<numPtclLocal; i++) {
18     PS::F32vec x32 = system[i].x;
19     system[i].pot -= pm.getPotential(x32);
20     system[i].agrv -= pm.getForce(x32);
21 }
22
23 //=====
24 /* [2] PP part
25 //=====
26 pp_tree.calcForceAll(Calc_force_ep_ep(),
27                     Calc_force_ep_sp(),
28                     system, dinfo);
29 for (PS::S32 i=0; i<numPtclLocal; i++) {
30     Nbody_PP_Results result = pp_tree.getForce(i);
31     system[i].pot += result.pot;
32     system[i].agrv += result.agrv;
33 }
34 };

```

PM パートの計算部分を以下に示す。PM の Force 計算を行うためには、ParticleMesh オブジェクト `pm` が領域情報と粒子情報を事前に知っている必要がある。そのため、サンプルコードでは、まず、API `setDomainInfoParticleMesh` と `setParticleParticleMesh` で、領域情報と粒子情報を `pm` オブジェクトに渡している。これで Force 計算を行う準備ができることになる。Force 計算は API `calcMeshForceOnly` で行う。Force 計算の結果を取得するため、API `getPotential` と API `getForce` で粒子の位置でのポテンシャルと加速度を取得し、それを FullParticle 型のオブジェクト `system` に足し込んでいる。この足し込み演算を`--`で行っていることに注意して頂きたい。`+=`ではなく、`--`を使用する理由は、FDPS の拡張機能 PM は重力を想定してポテンシャルを計算するからである。すなわち、拡張機能 PM では、電荷  $m(>0)$  は正のポテンシャルを作るべきところを、質量  $m > 0$  の重力ポテンシャルとして計算する。このポテンシャルは負値である。したがって、拡張機能 PM を Coulomb 相互作用で使用するには符号反転が必要となる。

Listing 50: PM パートの計算

```

1 pm.setDomainInfoParticleMesh(dinfo);
2 pm.setParticleParticleMesh(system);
3 pm.calcMeshForceOnly();
4 for (PS::S32 i=0; i<numPtclLocal; i++) {
5     PS::F32vec x32 = system[i].x;
6     system[i].pot -= pm.getPotential(x32);
7     system[i].agrv -= pm.getForce(x32);
8 }

```

次に、PP パートの計算部分を以下に示す。PP パートの Force 計算はツリークラスの `calcForceAll` メソッドによって行う(ここで、`calcForceAllAndWriteBack` メソッドを使用しないのは、これを使うと PM パートの結果が 0 クリアされてしまうためである)。次に、`getForce` メソッドを使用して、Force 計算で求めた粒子の位置でのポテンシャルと加速度を取得し、FullParticle 型のオブジェクト `system` に書き込んでいる。

## Listing 51: PP パートの計算

---

```

1 pp_tree.calcForceAll(Calc_force_ep_ep(),
2                         Calc_force_ep_sp(),
3                         system, dinfo);
4 for (PS::S32 i=0; i<numPtclLocal; i++) {
5     Nbody_PP_Results result = pp_tree.getForce(i);
6     system[i].pot += result.pot;
7     system[i].agrv += result.agrv;
8 }
```

---

## 6.1.4.5 エネルギー相対誤差の計算

エネルギーの相対誤差の計算は関数 `calc_energy_error` で行っている。ここでは、解析解の値としては  $E_0 \equiv 2E = -1.7475645946332$  を採用した。これは、PM<sup>3</sup>(Particle-Mesh Multipole Method) で数値的に求めた値である。

## 6.1.5 コンパイル

本サンプルコードでは FFTW ライブラリ (<http://www.fftw.org>) を使用するため、ユーザ環境に FFTW3 をインストールする必要がある。コンパイルは、付属の Makefile 内の変数 `FFTW_LOC` と `FDPS_LOC` に、FFTW と FDPS のインストール先の PATH をそれぞれ指定し、`make` コマンドを実行すればよい。

\$ make

コンパイルがうまく行けば、`work` ディレクトリに実行ファイル `p3m.x` が作成されているはずである。

## 6.1.6 実行

FDPS 拡張機能の仕様から、本サンプルコードはプロセス数が 2 以上の MPI 実行でなければ、正常に動作しない。そこで、以下のコマンドでプログラムを実行する:

\$ MPIRUN -np NPROC ./p3m.x

ここで、“MPIRUN”には `mpirun` や `mpiexec` などの mpi 実行プログラムが、“NPROC”にはプロセス数が入る。

## 6.1.7 結果の確認

計算が終了すると、`work` フォルダ下にエネルギーの相対誤差を記録したファイルが出力される。結果をプロットすると、図 3 のようになる。

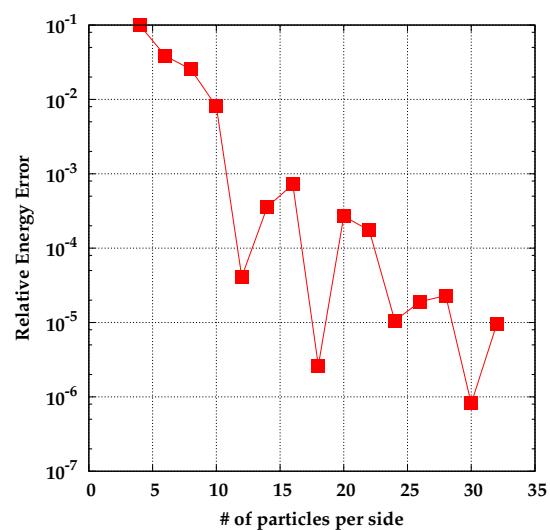


図 3: 1辺あたりの粒子数とエネルギー相対誤差の関係 (メッシュ数は  $16^3$ 、カットオフ半径は  $3/16$ )

## 6.2 TreePM コード

本節では、FDPS の拡張機能 Particle Mesh (以下、PM と省略する) の使用方法について、TreePM(Tree-Particle-Mesh) 法のサンプルコードを用いて解説を行う。このサンプルコードでは、宇宙論的  $N$  体シミュレーションを TreePM 法を用いて実行する。TreePM 法は第 6.1 節で説明した  $P^3M$  法と同様、重力計算を PP パートと PM パートに split して行う。したがって、使用する FDPS の機能は  $P^3M$  法のサンプルコードとほぼ同じである。2 つの方法の違いは、TreePM 法では PP パートの計算を直接法(ダイレクトサム法)ではなく Tree 法を使って計算する点にある。

### 6.2.1 サンプルコードの場所と作業ディレクトリ

サンプルコードの場所は、\$(FDPS)/sample/c++/treepm である。まずは、そこに移動する。下に示すように、サンプルコードは複数のファイルから構成される。この内、FDPS に関係した部分は主に treepm.hpp と treepm.cpp に実装されている。以下の説明では、適宜、ファイル名を参照していく。

```
$ cd $(FDPS)/sample/c++/treepm
$ ls | awk '{print $0}'
IC/
Makefile
README_en.txt
README_ja.txt
constants.hpp
cosmology.hpp
fig/
make_directory.c
param_file_for_test.txt
prototype.h
result/
run_param.hpp
test.py*
timing.c
treepm.cpp
treepm.hpp
utils/
```

### 6.2.2 ヘッダファイルのインクルード

FDPS の標準機能と拡張機能の両方を使うため、メイン関数が定義されたファイル treepm.cpp で、particle\_simulator.hpp と particle\_mesh.hpp をインクルードしている：

Listing 52: Include FDPS

---

```

1 #include <particle_simulator.hpp>
2 #include <particle_mesh.hpp>

```

---

### 6.2.3 ユーザー定義クラス

FDPSを使用するため、ユーザはユーザ定義クラスを実装しなければならない。本節では、ユーザ定義クラスをサンプルコードでどのように実装しているかを説明する。

#### 6.2.3.1 FullParticle 型

ユーザーは FullParticle 型を記述しなければならない。FullParticle 型には、計算を行うにあたり、粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている必要がある。Listing 53 に、サンプルコードの FullParticle 型を示す。このサンプルコードでは通常の  $N$  体計算に必要なメンバ変数 (id, mass, eps, pos, vel, acc) に加え、PM パートの加速度を格納する acc\_pm、ハップル定数を格納する H0、計算領域の大きさを  $\text{Mpc h}^{-1}$  単位で格納する Lbnd が用意されている。また、FDPS の標準機能・拡張機能を使うため、以下のメンバ関数を持たせる必要がある:

- getCharge() — FDPS が粒子の質量を取得するのに必要
- getChargeParticleMesh() — FDPS の PM モジュールが粒子の電荷量を取得するために必要
- getPos() — FDPS が粒子座標を取得するのに必要
- getRSearch() — FDPS がカットオフ半径を取得するのに必要
- setPos() — FDPS が粒子の座標を書き込むのに必要
- copyFromForce() — Force 型から結果をコピーするのに必要なメンバ関数
- copyFromForceParticleMesh() — PM モジュールが力の計算結果を書き込むために必要

さらに、FDPS の入出力関数を使用するため、以下のメンバ関数を定義してある:

- readBinary()
- writeBinary()

但し、この 2 つは必須ではなく、ユーザ独自の入出力関数を定義してもよい。

Listing 53: FullParticle 型

---

```

1 class FPtreePM {
2 private:
3     template<class T>
4     T reverseEndian(T value){
5         char * first = reinterpret_cast<char*>(&value);
6         char * last = first + sizeof(T);
7         std::reverse(first, last);
8         return value;
9     }

```

---

```

10 public:
11     PS::S64      id;
12     PS::F32      mass;
13     PS::F32      eps;
14     PS::F64vec   pos;
15     PS::F64vec   vel;
16     PS::F64vec   acc;
17     PS::F64vec   acc_pm;
18
19 //static PS::F64vec low_boundary;
20 //static PS::F64vec high_boundary;
21 //static PS::F64 unit_l;
22 //static PS::F64 unit_m;
23 static PS::F64 H0;
24 static PS::F64 Lbnd;
25
26 PS::F64vec getPos() const {
27     return pos;
28 }
29
30 PS::F64 getCharge() const {
31     return mass;
32 }
33
34 void copyFromForce(const Result_treepm & force) {
35     this->acc = force.acc;
36 }
37
38 PS::F64 getRSearch() const {
39     PS::F64 rcut = 3.0/SIZE_OF_MESH;
40     return rcut;
41 }
42
43 void setPos(const PS::F64vec pos_new) {
44     this->pos = pos_new;
45 }
46
47 PS::F64 getChargeParticleMesh() const {
48     return this->mass;
49 }
50
51 void copyFromForceParticleMesh(const PS::F64vec & acc_pm) {
52     this->acc_pm = acc_pm;
53 }
54
55 /*
56 void writeParticleBinary(FILE *fp) {
57     int count;
58     count = 0;
59
60     count += fwrite(&mass, sizeof(PS::F32), 1, fp);
61     count += fwrite(&eps, sizeof(PS::F32), 1, fp);
62     count += fwrite(&pos[0], sizeof(PS::F64), 1, fp);
63     count += fwrite(&pos[1], sizeof(PS::F64), 1, fp);
64     count += fwrite(&pos[2], sizeof(PS::F64), 1, fp);

```

```

65     count += fwrite(&vel[0], sizeof(PS::F64), 1, fp);
66     count += fwrite(&vel[1], sizeof(PS::F64), 1, fp);
67     count += fwrite(&vel[2], sizeof(PS::F64), 1, fp);
68 }
69 */
70 /*
71 int readParticleBinary(FILE *fp) {
72     int count;
73     count = 0;
74
75     count += fread(&mass, sizeof(PS::F32), 1, fp);
76     count += fread(&eps, sizeof(PS::F32), 1, fp);
77     count += fread(&pos[0], sizeof(PS::F64), 1, fp);
78     count += fread(&pos[1], sizeof(PS::F64), 1, fp);
79     count += fread(&pos[2], sizeof(PS::F64), 1, fp);
80     count += fread(&vel[0], sizeof(PS::F64), 1, fp);
81     count += fread(&vel[1], sizeof(PS::F64), 1, fp);
82     count += fread(&vel[2], sizeof(PS::F64), 1, fp);
83
84     return count;
85 }
86 */
87
88 void writeParticleBinary(FILE *fp) {
89     PS::F32 x = pos[0];
90     PS::F32 y = pos[1];
91     PS::F32 z = pos[2];
92     PS::F32 vx = vel[0];
93     PS::F32 vy = vel[1];
94     PS::F32 vz = vel[2];
95     PS::S32 i = id;
96     PS::S32 m = mass;
97     fwrite(&x, sizeof(PS::F32), 1, fp);
98     fwrite(&vx, sizeof(PS::F32), 1, fp);
99     fwrite(&y, sizeof(PS::F32), 1, fp);
100    fwrite(&vy, sizeof(PS::F32), 1, fp);
101    fwrite(&z, sizeof(PS::F32), 1, fp);
102    fwrite(&vz, sizeof(PS::F32), 1, fp);
103    //fwrite(&mass, sizeof(PS::F32), 1, fp);
104    fwrite(&m, sizeof(PS::F32), 1, fp);
105    fwrite(&i, sizeof(PS::F32), 1, fp);
106    //fwrite(&id, sizeof(PS::F32), 1, fp);
107 }
108
109
110 // for API of FDPS
111 // in snapshot, L unit is Mpc/h, M unit is Msun, v unit is km/s
112 void readBinary(FILE *fp){
113     static PS::S32 ONE = 1;
114     static bool is_little_endian = *reinterpret_cast<char*>(&ONE) ==
115         ONE;
116     static const PS::F64 Mpc_m = 3.08567e22; // unit is m
117     static const PS::F64 Mpc_km = 3.08567e19; // unit is km
118     static const PS::F64 Msun_kg = 1.9884e30; // unit is kg
119     static const PS::F64 G = 6.67428e-11; // m^3*kg^-1*s^-2

```

```

119     static const PS::F64 Cl = 1.0 / FPtreepm::Lbnd;
120     static const PS::F64 Cv = 1.0 / (FPtreepm::Lbnd * FPtreepm::H0);
121     static const PS::F64 Cm = 1.0 / (pow(Mpc_m*FPtreepm::Lbnd, 3.0) /
122                                     pow(Mpc_km/FPtreepm::H0, 2.0) / G / Msun_kg);
123     PS::F32 x, y, z, vx, vy, vz, m;
124     PS::S32 i;
125     fread(&x, 4, 1, fp);
126     fread(&vx, 4, 1, fp);
127     fread(&y, 4, 1, fp);
128     fread(&vy, 4, 1, fp);
129     fread(&z, 4, 1, fp);
130     fread(&vz, 4, 1, fp);
131     fread(&m, 4, 1, fp);
132     fread(&i, 4, 1, fp);
133     if( is_little_endian){
134         pos.x = x * Cl;
135         pos.y = y * Cl;
136         pos.z = z * Cl;
137         vel.x = vx * Cv;
138         vel.y = vy * Cv;
139         vel.z = vz * Cv;
140         mass = m * Cm;
141         //mass = m / 1.524e17;
142         id = i;
143     }
144     else{
145         pos.x = reverseEndian(x) * Cl;
146         pos.y = reverseEndian(y) * Cl;
147         pos.z = reverseEndian(z) * Cl;
148         vel.x = reverseEndian(vx) * Cv;
149         vel.y = reverseEndian(vy) * Cv;
150         vel.z = reverseEndian(vz) * Cv;
151         mass = reverseEndian(m) * Cm;
152         //mass = reverseEndian(m) / 1.524e17;
153         id = reverseEndian(i);
154     }
155 }
156 // for API of FDPS
157 void writeBinary(FILE *fp){
158     static const PS::F64 Mpc_m = 3.08567e22; // unit is m
159     static const PS::F64 Mpc_km = 3.08567e19; // unit is km
160     static const PS::F64 Msun_kg = 1.9884e30; // unit is kg
161     static const PS::F64 G = 6.67428e-11; // m^3*kg^-1*s^-2
162     static const PS::F64 Cl = FPtreepm::Lbnd;
163     static const PS::F64 Cv = (FPtreepm::Lbnd * FPtreepm::H0);
164     static const PS::F64 Cm = (pow(Mpc_m*FPtreepm::Lbnd, 3.0) / pow(
165                                     Mpc_km/FPtreepm::H0, 2.0) / G / Msun_kg);
166     PS::F32vec x = pos * Cl;
167     PS::F32vec v = vel * Cv;
168     PS::F32 m = mass * Cm;
169     PS::S32 i = id;
170     fwrite(&x.x, sizeof(PS::F32), 1, fp);
171     fwrite(&v.x, sizeof(PS::F32), 1, fp);
172     fwrite(&x.y, sizeof(PS::F32), 1, fp);

```

```

172     fwrite(&v.y,    sizeof(PS::F32), 1, fp);
173     fwrite(&x.z,    sizeof(PS::F32), 1, fp);
174     fwrite(&v.z,    sizeof(PS::F32), 1, fp);
175     fwrite(&m,      sizeof(PS::F32), 1, fp);
176     fwrite(&i,      sizeof(PS::S32), 1, fp);
177 }
178
179 PS::F64 calcDtime(run_param &this_run) {
180     PS::F64 dtime_v, dtime_a, dtime;
181     PS::F64 vnorm, anorm;
182     vnorm = sqrt(SQR(this->vel))+TINY;
183     anorm = sqrt(SQR(this->acc+this->acc_pm))+TINY;
184
185     dtime_v = this->eps/vnorm;
186     dtime_a = sqrt(this->eps/anorm)*CUBE(this_run.anow);
187
188     dtime = fmin(0.5*dtime_v, dtime_a);
189
190     return dtime;
191 }
192 };

```

### 6.2.3.2 EssentialParticleI 型

ユーザーは EssentialParticleI 型を記述しなければならない。EssentialParticleI 型には、PP パートの Force 計算を行う際、 $i$  粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 54 に、サンプルコードの EssentialParticleI 型を示す。この EssentialParticleI 型には、前述した FullParticle 型から値をコピーするのに必要なメンバ関数 copyFromFP() と、EssentialParticleI 型の粒子座標を返すメンバ関数 getPos() を持たせる必要がある。

Listing 54: EssentialParticleI 型

```

1 class EPItreepm {
2 public:
3     PS::S64 id;
4     PS::F32 eps;
5     PS::F64vec pos;
6
7     PS::F64vec getPos() const {
8         return this->pos;
9     }
10
11    void copyFromFP(const FPtreepm & fp) {
12        this->id = fp.id;
13        this->eps = fp.eps;
14        this->pos = fp.pos;
15    }
16
17 };

```

### 6.2.3.3 EssentialParticleJ 型

ユーザーは EssentialParticleJ 型を記述しなければならない。6.1 節の P<sup>3</sup>M コードの例では、EssentialParticleJ 型は EssentialParticleI 型で兼ねていたが、このサンプルコードでは別のクラスとして定義してある。EssentialParticleJ 型には、PP パートの Force 計算を行う際、*j* 粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 55 に、サンプルコードの EssentialParticleJ 型を示す。この EssentialParticleJ 型には、以下のメンバ関数を持たせる必要がある:

- `getPos()` — FDPS が粒子位置を取得するのに必要
- `getCharge()` — FDPS が粒子質量を取得するのに必要
- `copyFromFP()` — FDPS が FullParticle 型から EssentialParticleJ 型に必要な情報を渡すのに必要
- `getRSearch()` — FDPS がカットオフ半径を取得するのに必要
- `setPos()` — FDPS が粒子座標を書き込むのに必要

Listing 55: EssentialParticleJ 型

---

```

1 class EPJtreepm {
2 public:
3     PS::S64      id;
4     PS::F64vec  pos;
5     PS::F64      mass;
6     // PS::F64      rcut;
7
8     PS::F64vec  getPos() const {
9         return this->pos;
10    }
11
12    PS::F64  getCharge() const {
13        return this->mass;
14    }
15
16    void copyFromFP(const FPtreepm & fp) {
17        this->id = fp.id;
18        this->mass = fp.mass;
19        this->pos = fp.pos;
20    }
21
22    PS::F64  getRSearch() const {
23        PS::F64 rcut = 3.0/SIZE_OF_MESH;
24        return rcut;
25    }
26
27    void setPos(const PS::F64vec pos_new) {
28        this->pos = pos_new;
29    }
30 };

```

---

### 6.2.3.4 Force 型

ユーザーは Force 型を記述しなければならない。Force 型は、PP パートの Force の計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。本サンプルコードの Force 型を Listing 56 に示す。Force 型には積算対象のメンバ変数を 0 ないし初期値に設定するための関数 clear() が必要になる。

Listing 56: Force 型

---

```

1 class Result_treepm {
2 public:
3     PS::F32vec acc;
4     PS::F32    pot;
5
6     void clear() {
7         acc = 0.0;
8         pot = 0.0;
9     }
10};
```

---

### 6.2.3.5 calcForceEpEp 型

ユーザーは calcForceEpEp 型を記述しなければならない。calcForceEpEp 型には、PP パートの Force の具体的な内容を書く必要がある。サンプルコードの calcForceEpEp 型を Listing 57 に示す。このサンプルコードでは、calcForceEpEp 型はファンクタ（関数オブジェクト）として実装されている（テンプレート関数として実装されていることに注意されたい）。また、Phantom-GRAPE ライブラリを使用するかどうかに応じて（マクロ定義 ENABLE\_PHANTOM\_GRAPE\_X86 で判定している）、場合分けして実装されている。いずれの場合でも、ファンクタの引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。

Listing 57: calcForceEpEp 型

---

```

1 template <class TPJ>
2 class calc_pp_force {
3 public:
4     void operator () (EPItreepm *iptcl,
5                         const PS::S32 ni,
6                         TPJ *jptcl,
7                         const PS::S32 nj,
8                         Result_treepm *ppforce) {
9         for (PS::S32 i=0; i < ni; i++) {
10             PS::F64 eps2 = SQR(iptcl[i].eps);
11             for (PS::S32 j=0; j < nj; j++) {
12                 PS::F64vec dr = iptcl[i].pos - jptcl[j].pos;
13                 PS::F64 rsq = dr*dr;
14                 PS::F64 rad = sqrt(rsq+eps2);
15                 PS::F64 gfact = gfactor_S2(rad, 3.0/SIZE_OF_MESH);
16                 PS::F64 rinv = 1.0/rad;
17                 PS::F64 mrinv3 = jptcl[j].mass*CUBE(rinv);
18                 ppforce[i].acc -= dr*gfact*mrinv3;
```

---

---

```

19         }
20     }
21 }
22 };

```

---

TreePM 法の PP パートは、P<sup>3</sup>M 法と同様、距離に関するカットオフ付きの 2 体相互作用である。そのため、ここでも加速度計算にカットオフ関数が掛かる。[6.1.2.4](#) 節で解説したように、カットオフ関数は Hockney & Eastwood (1988) の S2 型の粒子形状関数に対応したカットオフ関数である必要がある。Phantom-GRAPE ライブラリを使用しない場合の実装では、カットオフ関数が関数 gfactor\_S2() として定義されている。一方、Phantom-GRAPE ライブラリを使用する場合には、カットオフが考慮されたバージョンの Phantom-GRAPE ライブラリが使用されるようになっている。Phantom-GRAPE ライブラリに指定したカットオフ半径で計算させるため、API pg5\_gen\_s2\_force\_table() を事前に呼び出しておく必要がある。サンプルコードでは、メイン関数でこれを行っている:

---

```

1 #ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
2     //g5_open();
3     pg5_gen_s2_force_table(EPS_FOR_PP, 3.0/SIZE_OF_MESH);
4 #endif

```

---

#### 6.2.4 プログラム本体

本節では、サンプルコード本体について解説を行う。詳細な説明に入る前に、サンプルコードの内容と全体構造について説明を与える。[6.2](#) 節冒頭で述べたように、このサンプルコードでは宇宙論的 N 体シミュレーションを TreePM 法を用いて実行する。初期条件としては、以下の 3 つの場合に対応している:

- (a) Santa Barbara Cluster Comparison Test ([Frenk et al.\[1999, ApJ, 525, 554\]](#)) で用いられた初期条件 (<https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnZvW5XAYwfqZYQ?path=%2Fsb> から初期条件入手可能。ファイル ic\_sb128.tar は粒子数 128<sup>3</sup> のデータ、ファイル ic\_sb256.tar は粒子数 256<sup>3</sup> のデータ)
- (b) 上記テストで用いられた初期条件ファイルと同じフォーマットで記述された初期条件
- (c) ランダムにおいた粒子分布

実行時のコマンドライン引数として初期条件を指定した後、初期条件ファイル内で指定された終了時刻 (赤方偏移  $z$ ) まで、TreePM 法で粒子の運動を計算する。各初期条件に対応したパラメータファイルのファイルフォーマットについては、\$(FDPS)/sample/c++/treepm/README\_ja.txt で説明されているので、そちらを参照されたい。また、\$(FDPS)/sample/c++/treepm/result/input.para に、(a) の場合のパラメータファイルの記述例があるので、そちらも参照されたい。

コード全体の構造は以下のようになっている:

- (1) FDPS で使用するオブジェクトの生成と初期化
- (2) (必要であれば)Phantom-GRAPE ライブラリの初期化

- (3) 初期条件ファイルの読み込み
- (4) 終了時刻まで粒子の運動を計算

以下で、個々について詳しく説明を行う。

#### 6.2.4.1 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メイン関数に記述する。

Listing 58: FDPS の開始

---

```
1 PS::Initialize(argc, argv);
```

---

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メイン関数の最後に次のように記述する。

Listing 59: FDPS の終了

---

```
1 PS::Finalize();
```

---

#### 6.2.4.2 オブジェクトの生成と初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

##### 6.2.4.2.1 オブジェクトの生成

TreePM 法の計算では、P<sup>3</sup>M 法のときと同様、粒子群クラス、領域クラス、PP パートの計算で使用する tree を 1 本、そして、PM パートの計算に必要な ParticleMesh オブジェクトの生成が必要である。本サンプルコードでは、treepm.cpp のメイン関数内でオブジェクトの生成が行われている：

Listing 60: オブジェクトの生成

---

```
1 int main(int argc, char **argv)
2 {
3     PS::PM::ParticleMesh pm;
4     PS::ParticleSystem<FPtreepm> ptcl;
5     PS::DomainInfo domain_info;
6     PS::TreeForForceLong<Result_treepm, EPItreepm, EPJtreepm>::
7         MonopoleWithCutoff treepm_tree;
}
```

---

上記はサンプルコードからオブジェクト生成部分だけを抜き出してきたものであることに注意されたい。

### 6.2.4.2.2 オブジェクトの初期化

ほとんどのFDPSのオブジェクトは、生成後、初期化してから使用する必要がある。前節で説明した4つのオブジェクトの内、明示的な初期化が不要なのはParticleMeshクラスである。それ以外のオブジェクトに関しては、`initialize`メソッドで初期化を行う。以下に、サンプルコードでのオブジェクトの初期化を示す：

Listing 61: オブジェクトの初期化

---

```

1 int main(int argc, char **argv)
2 {
3     // Initialize ParticleSystem
4     ptcl.initialize();
5
6     // Initialize DomainInfo
7     domain_info.initialize();
8     domain_info.setBoundaryCondition(PS::BOUNDARY_CONDITION_PERIODIC_XYZ);
9     domain_info.setPosRootDomain(PS::F64vec(0.0, 0.0, 0.0),
10                                PS::F64vec(1.0, 1.0, 1.0));
11
12    // Initialize Tree
13    treepm_tree.initialize(3*ptcl.getNumberOfParticleGlobal(),
14                           this_run.theta);
15 }
```

---

粒子群クラスのオブジェクトの初期化は、単に`initialize`メソッドを引数無しで呼び出すだけである。

領域クラスに関しては、`initialize`メソッド呼び出し後に、境界条件と境界の大きさを指定する必要がある。これらはそれぞれ`setBoundaryCondition`メソッドと`setPosRootDomain`メソッドで行う。

ツリーオブジェクトの初期化の際には、`initialize`メソッドに計算で使用する大雑把な粒子数を第1引数として渡す必要がある。本サンプルコードでは、全粒子数の3倍の値を渡している。第2引数には、tree法で力の計算を行う際のopening angle criterion  $\theta$ を指定する。本サンプルコードでは、 $\theta$ をはじめとした、計算を制御するパラメータ群を構造体`this_run`のメンバ変数としてまとめている。

### 6.2.4.3 初期条件の設定

初期条件を指定するパラメータファイルの読み込みは、メイン関数で呼ばれる関数`read_param_file()`内で行われる：

---

```
1 read_param_file(ptcl, this_run, argv[1]);
```

---

この関数ではプログラム実行時に指定されたパラメータファイルを読み込み、粒子群クラスのオブジェクト`ptcl`に粒子データをセットする。サンプルコードでは、この後、FDPSのAPIを使って、領域分割と粒子交換を行っている。以下でこれらのAPIについて解説する。

#### 6.2.4.3.1 領域分割の実行

粒子分布に基いて領域分割を実行するには、領域クラスの `decomposeDomainAll` メソッドを使用する：

Listing 62: 領域分割の実行

---

```
1 domain_info.decomposeDomainAll(ptcl);
```

---

ここで、粒子分布の情報を領域クラスに与えるため、引数に粒子群クラスのオブジェクトが渡されていることに注意されたい。この領域分割はメイン関数内で行われている。

#### 6.2.4.3.2 粒子交換の実行

領域情報に基いてプロセス間の粒子の情報を交換するには、粒子群クラスの `exchangeParticle` メソッドを使用する：

Listing 63: 粒子交換の実行

---

```
1 ptcl.exchangeParticle(domain_info);
```

---

ここで領域情報を粒子群クラスに与えるため、引数に領域クラスのオブジェクトが渡されていることに注意する。

#### 6.2.4.4 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が完了したら、計算開始時の加速度を決定するため、相互作用計算を行う必要がある。以下に、本サンプルコードでの相互作用計算の実装を示す。本サンプルコードでは、PP パートの計算にはツリーオブジェクトの `calcForceAllAndWriteBack` メソッドを使用している。このメソッドを実行することで、粒子群オブジェクトのメンバ変数 `acc` に PP パートの加速度が格納される。PM パートの計算には `ParticleMesh` オブジェクトの `calcForceAllAndWriteBack` メソッドを使用している。これによって、粒子群クラスのメンバ変数 `acc_pm` に PM パートの加速度が格納される。

Listing 64: 相互作業計算の実行

---

```
1 /* PP part
2 treepm_tree.calcForceAllAndWriteBack
3   (calc_pp_force<EPJtreepm>(),
4   calc_pp_force<PS::SPJMonopoleCutoff>(),
5   ptcl,
6   domain_info);
7
8 /* PM part
9 pm.calcForceAllAndWriteBack(ptcl, domain_info);
```

---

### 6.2.4.5 時間積分ループ

本サンプルコードでは、時間積分を Leapfrog 時間積分法によって行っている（この方法に関しては、[4.1.3.4.4 節](#)を参照されたい）。粒子位置を時間推進する  $D(\cdot)$  オペレータは関数 `drift_ptcl`、粒子速度を時間推進する  $K(\cdot)$  オペレータは関数 `kick_ptcl` として実装されている。宇宙膨張の効果は関数 `kick_ptcl` 内で考慮されている。また、スケールファクターやハップルパラメータの時間発展は構造体 `this_run` のメンバ関数 `update_expansion` で計算されている。

### 6.2.5 コンパイル

`README.txt` で説明されているように、`Makefile` を適宜編集し、`make` コマンドを実行することでコンパイルすることができる。 $P^3M$  コード同様、本サンプルコードでも FFTW ライブラリを使用するため、ユーザ自身でインストールする必要がある。コンパイルが成功すれば、実行ファイル `treepm` が作成されているはずである。

### 6.2.6 実行

FDPS の拡張機能 ParticleMesh の仕様上、プロセス数が 2 以上の MPI 実行でなければ正常に動作しない。そこで、以下のように実行する必要がある：

```
$ MPIRUN -np NPROC ./treepm
```

ここで、”MPIRUN”には `mpirun` や `mpiexec` などの MPI 実行プログラムが、”NPROC”にはプロセス数が入る。

### 6.2.7 結果の確認

計算が終了するとパラメータファイルで指定されたディレクトリに計算結果が出力されるはずである。粒子数  $256^3$  で、Santa Barbara Cluster Comparison Test を実行した場合の、ダークマター密度分布の時間発展の様子を図 [4](#) に示す。

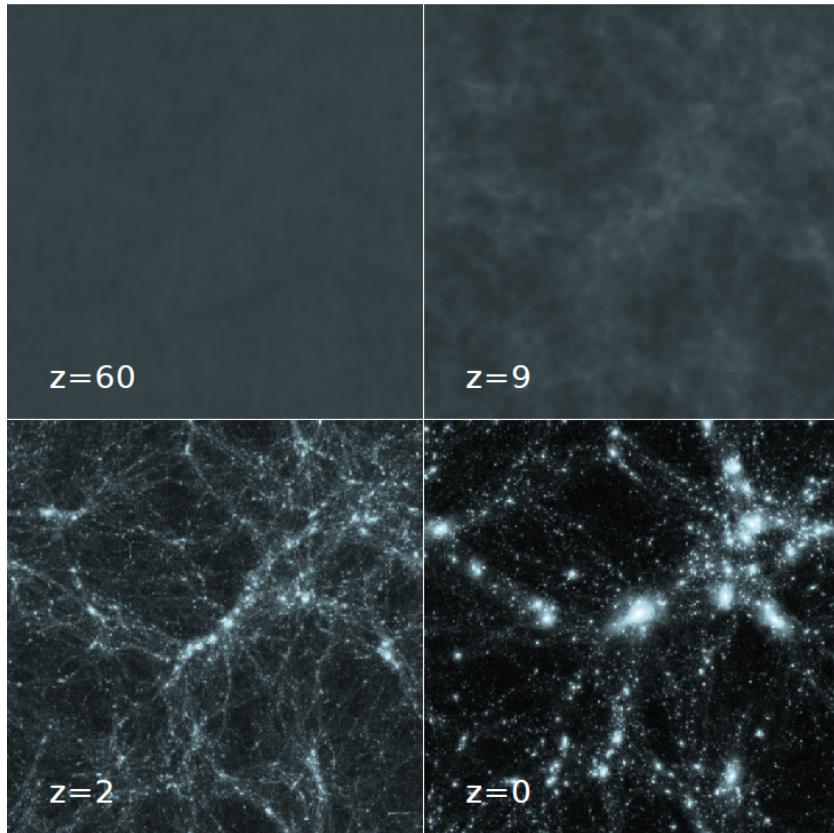


図 4: Santa Barbara Cluster Comparison テストの密度分布の時間発展 (粒子数  $256^3$ )

### 6.3 PM<sup>3</sup> の精度確認プログラム

本節では、立方体領域に一様に粒子をばらまいた時の重力(ケーロン力)を、PM<sup>3</sup>で計算し、Ewald 法で計算した結果と比較するプログラムについての解説を行う。出力は PM3 法で計算した力とポテンシャルと Ewald 法で計算した結果の相対的な差を累積分布関数である。このサンプルを通して、FDPS の拡張機能である Particle Mesh Multipole Method(PM<sup>3</sup>) モジュールの利用方法を説明する。

#### 6.3.1 PM<sup>3</sup> の概要

周期境界条件下での  $1/r$  ポテンシャルを計算するために、FDPS では PM<sup>3</sup> モジュールを提供している。この節では、PM<sup>3</sup>(Particle Mesh Multipole Moment) の概要を説明する。より詳しい説明は原論文 Nitadori[2014] を参照されたい。

### 6.3.1.1 Multipole Moment, Local Expansion によるポテンシャル計算

まず,  $1/r$  ポテンシャルを念頭に, 以下のような展開を考える .

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_S - \mathbf{r}_R|} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l S_l^{-m}(\mathbf{r}_S) R_l^m(-\mathbf{r}_R), \quad (7)$$

$$R_l^m(r, \theta, \phi) = \frac{r^l}{(l+m)!} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (8)$$

$$S_l^m(r, \theta, \phi) = (-1)^{l+m} \frac{(l-m)!}{r^{l+1}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (9)$$

ここで,  $|\mathbf{r}_S| > |\mathbf{r}_R|$  とする . また,  $R_l^m$  は regular solid harmonics,  $S_l^m$  は singular solid harmonics と呼ばれる . ここでの定義は Nitadori[2014] に従っており, 通常の定義と少し異なることに注意されたい .

さらに,  $\mathbf{r}_i$  にある電荷  $q_i$  が作る  $\mathbf{r}_M$  での Multipole Moment,  $M_l^m|_{\mathbf{r}_M}$  を以下のように定義する (P2M) .

$$M_l^m|_{\mathbf{r}_M} = \sum_i q_i R_l^m(\mathbf{r}_M - \mathbf{r}_i). \quad (10)$$

$\mathbf{r}_M$  での Multipole Moment( $M_l^m|_{\mathbf{r}_M}$ ) から  $\mathbf{r}_L$  での Local Expansion( $L_l^m|_{\mathbf{r}_L}$ ) への変換は以下のように表すことができる (M2L) .

$$L_l^m|_{\mathbf{r}_L} = \sum_{\lambda=0}^p \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} M_{\lambda}^{\mu}|_{\mathbf{r}_M} S_{l+\lambda}^{-(m+\mu)}(\mathbf{r}_L - \mathbf{r}_M). \quad (11)$$

Local Expansion を用いると  $\mathbf{r}$  でのポテンシャル  $\Phi(\mathbf{r})$  は以下のように書ける (L2P) .

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l L_l^m|_{\mathbf{r}_L} R_l^m(\mathbf{r} - \mathbf{r}_L). \quad (12)$$

ただし, このポテンシャルが収束するためには  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_L| < |\mathbf{r} - \mathbf{r}_M|$  である必要があり,  $\mathbf{r}$  の近傍の粒子からの寄与は粒子同士の直接相互作用として計算する必要がある . FDPS ではこの計算にツリー法を用い, 高速に計算する事が可能となっている .

### 6.3.1.2 PM<sup>3</sup> での計算手順

前のセクションで PM<sup>3</sup> で必要な計算式を説明した . ここでは, PM<sup>3</sup> の計算手順を説明する .

先ず, 計算領域全体を規則格子に分割し, 各格子内の粒子が作る多重極展開  $M_l^m$  を計算する .

次に M2L により Local Expansion を求める . PM<sup>3</sup> モジュールでは周期境界条件を考慮しているため, 全てのセルからの Multipole Moment による Local Expansion は以下のようになる .

$$L_l^m|_{\mathbf{r}_L} = \sum_{\mathbf{n}} \sum_M \sum_{\lambda=0}^p \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} M_{\lambda}^{\mu}|_{\mathbf{r}_M} S_{l+\lambda}^{-(m+\mu)}(\mathbf{r}_L - (\mathbf{r}_M + \mathbf{r}_{\mathbf{n}})). \quad (13)$$

ここで， $M$  に関する和は，計算領域全体の格子点に対する和を表し， $\mathbf{n}$  は周期境界条件により無限に存在するイメージセルを表す．また， $\mathbf{r}_n = (n_x L_x, n_y L_y, n_z L_z)$  とし  $(L_x, L_y, L_z)$  は計算領域の長さであり， $(n_x, n_y, n_z)$  はそれぞれの方向の格子数を表す整数ベクトルである．

さらに  $L_l^m|_{\mathbf{r}_L}$  の収束を速めるために以下のような分割を考える．

$$G_{l,\lambda}^{m,\mu}|_{\mathbf{r}_L-\mathbf{r}_M} = \sum_{\mathbf{n}} S_{l+\lambda}^{-(m+\mu)}(\mathbf{r}_L - (\mathbf{r}_M + \mathbf{r}_n)) = \quad (14)$$

$$\left( \sum_{\mathbf{n}} \frac{\Gamma(l+\lambda+1/2, \alpha^2 |\mathbf{r}_L - (\mathbf{r}_M + \mathbf{r}_n)|^2)}{\Gamma(l+\lambda+1/2)} S_{l+\lambda}^{-(m+\mu)}(\mathbf{r}_L - (\mathbf{r}_M + \mathbf{r}_n)) \right) \quad (15)$$

$$+ \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \frac{(-i\pi)^{(l+\lambda)}}{\sqrt{\pi}} \frac{\exp(-(\pi k_n)/\alpha)^2}{\Gamma(l+\lambda+1/2)} \frac{k_n^{2(l+\lambda)-1}}{V} S_{l+\lambda}^{-(m+\mu)}(\mathbf{k}_n) \cdot \exp(2\pi i \mathbf{k}_n \cdot (\mathbf{r}_L - \mathbf{r}_M)) \right) \quad (16)$$

ここで，第一項は実空間での計算，第二項は波数空間での計算を表す．また， $\mathbf{k}_n = (n_x/L_x, n_y/L_y, n_z/L_z)$ ， $V = L_x L_y L_z$  は計算領域の体積である．

これを用いて，

$$L_l^m|_{\mathbf{r}_L} = \sum_{\lambda=0}^p \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \sum_M M_{\lambda}^{\mu}|_{\mathbf{r}_M} G_{l,\lambda}^{m,\mu}|_{\mathbf{r}_L-\mathbf{r}_M} \quad (17)$$

と書ける．

$PM^3$  では，これを畳み込み演算とみなし，FFT を用いて高速に  $L_l^m|_{\mathbf{r}_L}$  を計算する．

### 6.3.1.3 FDPS を用いた $PM^3$ の計算

FDPS の  $PM^3$  モジュールを用いた  $PM^3$  の計算方法について述べる．

まず，現在のバージョンでは  $PM^3$  モジュールは周期境界条件のみをサポートしているため，`PS::DomainInfo::setBoundaryCondition` で周期境界条件を設定し，`PS::DomainInfo::setPosRootDomain` で計算領域の大きさを設定する必要がある． $PM^3$  でのツリーの計算は通常の場合とツリーや相互作用リストの作り方が異なるため，`PS::TreeForForce` のサーチモードを `PS::SEARCH_MODE_LONG_PARTICLE_MESH_MULTIPOLE` に設定しオブジェクトを生成する必要がある．その後，`PS::TreeForForce::setParamPMM` を呼び出して  $PM^3$  で用いる格子数と近傍セルの数などのパラメータを設定し，`PS::TreeForForce::CalcForceAllAndWriteBack` で相互作用計算を行う．この時点では近傍セルからの寄与のみが計算されている．

その後， $PM^3$  モジュールの `PS::PMM::ParticleMeshMultipole` オブジェクトを生成し，`PS::PMM::ParticleMeshMultipole::initialize` で  $PM^3$  の精度を設定する．`PS::PMM::ParticleMeshMultipole::calcForceAllAndWriteBack` 関数を呼びだし遠方セルからの寄与を計算した値が返ってくる．この関数の呼び出し時に引数として先ほど計算した `PS::TreeForForce` クラスのオブジェクトも指定するが，これはすでに計算されているツリーの構造や Multipole Moment の情報を再利用するためである．このため， $PM^3$  モジュールでの計算はツリー法の計算の後に行う必要がある事に注意．

### 6.3.2 サンプルコードの場所

サンプルコードの場所は、`\$(FDPS)/sample/c++/pm3/accuracy_check` である。

### 6.3.3 ヘッダファイルのインクルード

メイン関数が定義されたファイル `main.cpp` 内で、FDPS の標準機能を使うためのヘッダーファイル `particle_simulator.hpp` の他に、PM 法を使うために `particle_mesh.hpp` と PM3 法を使うための `particle_mesh_multipole.hpp` をインクルードしている。

Listing 65: Include FDPS

---

```
1 #include <particle_simulator.hpp>
2 #include <particle_mesh_multipole.hpp>
```

---

### 6.3.4 ユーザー定義クラス

本節では、`ParticleMeshMultipole` クラスを使うための、ユーザ定義クラスをサンプルコードでどのように実装しているかを説明する。これらは、`user_defined.hpp` に記述されている。

#### 6.3.4.1 FullParticle 型

`FullParticle` 型には、計算を行うにあたり、粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている必要がある。Listing 66 に、サンプルコードの `FullParticle` 型を示す。

Listing 66: FullParticle 型

---

```
1 struct FP {
2     PS::S64 id;
3     PS::F64 charge;
4     PS::F64vec pos;
5     PS::F64vec vel;
6     PS::F64vec grad;
7     PS::F64 pot;
8     PS::F64vec getPos() const { return pos; }
9     PS::F64 getCharge() const { return charge; }
10    PS::F64 getChargeParticleMesh() const { return charge; }
11    void copyFromForce(const Force &f) {
12        this->grad = f.grad;
13        this->pot = f.pot;
14    }
15    void copyFromForceParticleMesh(const PS::F64vec &g) { this->grad = g;
16    }
17    void copyFromForcePMMM(const Force &f) { // copy force from PMMM
18        this->grad = f.grad;
19        this->pot = f.pot;
20    }
21    void setPos(const PS::F64vec &pos_new) { this->pos = pos_new; }
```

```

21     void clear() {
22         this->grad = 0.0;
23         this->pot = 0.0;
24     }
25     void dump(std::ostream &fout = std::cout) {
26         std::cout << "id=" << id << "charge=" << charge << "pos=" <<
27             pos << "vel=" << vel << "grad=" << grad << "pot=" <<
28             pot << std::endl;
29     }
30 };

```

PM3 モジュールを使うためには、以下のメンバ関数を持たせる必要がある：

- `copyFromForcePMM()` — PM<sup>3</sup> モジュールが力の計算結果を書き込むために必要

#### 6.3.4.2 EssentialParticle 型

Listing67 に、サンプルコードの EssentialParticle 型を示す。このサンプルでは、EssentialParticleI 型と EssentialParticleJ 型の区別はない。EssentialParticle 型には、PM3 モジュールのみが要求するメンバ関数はない。

Listing 67: EssentialParticle 型

```

1 struct EP {
2     PS::F64 charge;
3     PS::F64vec pos;
4     static inline PS::F64 r_search;
5     PS::F64vec getPos() const { return pos; }
6     void setPos(const PS::F64vec &pos_new) { this->pos = pos_new; }
7     PS::F64 getCharge() const { return charge; }
8     PS::F64 getRSearch() const { return r_search; }
9     void copyFromFP(const FP &fp) {
10         this->charge = fp.charge;
11         this->pos = fp.pos;
12     }
13 };

```

#### 6.3.4.3 Force 型

Force 型は Tree が返してくれる相互作用の結果の他に、PM<sup>3</sup> 法が返してくれるポテンシャルとポテンシャルの勾配を格納するためのメンバ変数を持たせる必要がある。Listing68 に、サンプルコードの Force 型を示す。

Listing 68: EssentialParticle 型

```

1 struct Force {
2     PS::F64vec grad;
3     PS::F64 pot;
4     void clear() {
5         grad = 0.0;
6         pot = 0.0;

```

---

```

7     }
8     void addForcePMMM(const PS::F64vec &f, const PS::F64 p) {
9         grad += f;
10        pot += p;
11    }
12 };

```

---

PM<sup>3</sup> モジュールを使う場合 , addForcePMMM(const F64vec, const F64) が必要となる .

- addForcePMMM(const F64vec, const F64) — PM<sup>3</sup> モジュールが計算した結果を TreeForForce クラスの Force 型のメンバに積算するために用いる .

メンバ関数 addForcePMMM(const F64vec, const F64) は PM<sup>3</sup> モジュールが計算したポテンシャル(第二引数)とその勾配(第一引数)を受け取り , TreeForForce クラスの Force 型のメンバに加算するために用意する . ここでは , Force 型のメンバ変数 pot にポテンシャルを , grad に勾配を格納するように実装されている . また , +=演算子を用いて実装しているが , これはツリー法で計算した結果に PM<sup>3</sup> モジュールで計算した結果を加算するためである .

PM<sup>3</sup> モジュールが返してくれるポテンシャル  $p$  とその勾配  $f$  はそれぞれ以下の形で定義される .

$$p = \phi(\mathbf{r}) = \sum_j \frac{X_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \quad (18)$$

$$f = \nabla \phi(\mathbf{r}) = - \sum_j \frac{X_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^3} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (19)$$

ここで ,  $X_j$  は重力の場合は粒子の質量 ( $m_j$ ) であり , クーロン力を計算する場合は粒子の電荷 ( $Q_j$ ) である .

例えば , 重力の場合には , 通常ポテンシャル  $\phi^g$  は負で定義するので以下のようにする .

$$\phi^g = -p \quad (20)$$

また , ポテンシャルから受ける力  $\mathbf{F}^g$  と加速度  $\mathbf{a}^g$  は ,

$$\mathbf{F}^g = m f \quad (21)$$

$$\mathbf{a}^g = f \quad (22)$$

となる . ここで ,  $m_i$  は粒子の質量である .

クーロン力の場合のポテンシャルは以下のように定義され

$$\phi^c = p, \quad (23)$$

受ける力  $\mathbf{F}^c$  と加速度  $\mathbf{a}^c$  は

$$\mathbf{F}^c = -Q f \quad (24)$$

$$\mathbf{a}^c = -\frac{Q}{m} f \quad (25)$$

のように書ける . ここで ,  $Q$  は粒子の電荷である .

### 6.3.5 プログラム本体

プログラム本体は `main.cpp` に記述されている。領域分割や粒子交換は他のサンプルコードと同様に行われるため、そちらを参照せよ。ここでは、PM<sup>3</sup> に関する部分のみを解説する。

### 6.3.6 ヘッダーファイルのインクルード

拡張機能 PM<sup>3</sup> を FDPS 標準機能とともに使用するため、`particle_simulator.hpp` に加え、`particle_mesh_multipole.hpp` をインクルードする。

Listing 69: ヘッダーファイルのインクルード

---

```
1 #include <particle_simulator.hpp>
2 #include <particle_mesh_multipole.hpp>
```

---

#### 6.3.6.1 TreeForForce オブジェクトの生成、初期化

Listing 70: Tree オブジェクトの作成

---

```
1 PS::TreeForForce<PS::SEARCH_MODE_LONG_PARTICLE_MESH_MULTIPOLE, Force, EP,
EP, PS::MomentQuadrupoleGeometricCenter,
2 PS::MomentQuadrupoleGeometricCenter, PS:::
SPJQuadrupoleGeometricCenter> tree_pm3;
3 tree_pm3.initialize(n_ptcl_loc, params.theta);
4 tree_pm3.setParamPMMM(params.n_cell_1d, params.i_cut);
```

---

PM3 法を使うためには、探索モードとして `PS::SEARCH_MODE_LONG_PARTICLE_MESH_MULTIPOLE` を指定しオブジェクトを生成する必要がある。さらに `setParamPMMM` メソッドを使って、PM3 法の計算に必要なパラメータを設定する。ここで、第一引数は、計算領域を分割するメッシュの数であり、S32 型で指定する。例えば、8 と指定すると、計算領域を  $8^3 = 512$  個のメッシュに分割することになる。第二引数は、Tree 法で計算する隣接セルの数を指定する。つまり、3 次元の場合、1 を指定すると、近傍  $27(3^3 = 27)$  個のセルに関してはツリー法で計算を行う。2 を指定すると、近傍セルの数は  $125(5^3 = 125)$  個となる。

#### 6.3.6.2 Tree 法による力の計算

Tree 法による力の計算は他のモードの場合と同様に `calcForceAllAndWriteBack` を使う。探索モードが `PS::SEARCH_MODE_LONG_PARTICLE_MESH_MULTIPOLE` の場合は、`setParamPMMM` で設定した隣接セルのみからの寄与が計算される。

Listing 71: tree による計算

---

```
1 tree_pm3.calcForceAllAndWriteBack(calc_p0<EP, EP, Force>, calc_p2<EP, PS:::
SPJQuadrupoleGeometricCenter, Force>, ptcl, domain_info);
```

---

### 6.3.6.3 PM<sup>3</sup> オブジェクトの生成，初期化

Listing 72: PM3 オブジェクトの作成

---

```
1 PS::PMMM::ParticleMeshMultipole<Force, EP> pm3;
2 pm3.initialize(p);
```

---

PM<sup>3</sup> 法を使うためには, PS::PMMM::ParticleMeshMultipole クラスのオブジェクトを生成する必要がある。テンプレート引数として, TreeForForce 型のオブジェクト生成時に指定した EssentialParticleI 型と Force 型を指定する。その後, PS::PMMM::ParticleMeshMultipole::initialize メソッドを使って, PM3 法の計算に必要なパラメータを設定する。ここで, 引数は多重極展開の精度を決める次数  $p$  であり,  $p = 0$  で单極子,  $p = 1$  で双極子,  $p = 2$  で四重極子となる。

### 6.3.6.4 PM<sup>3</sup> による力の計算

PM<sup>3</sup> で力を計算するためには PS::PMMM::calcForceAllAndWriteBack メソッドを使う。ここで, 第一引数が TreeForForce, 第二引数が DomainInfo, 第三引数が ParticleSystem のオブジェクトである。PS::TreeForForce::calcForceAllAndWriteBack は必ず PS::TreeForForce::calcForceAllAndWriteBack 呼び出した後に呼び出す必要がある。これは PM<sup>3</sup> の計算には Tree 法での相互作用計算時に計算されたツリー構造や多重局展開の係数を使用するためである。

PM3 で計算された力は Force::addForcePMMM() を通して TreeForForce の内部の Force 型のメンバに加算され, さらに, FP::copyFromForcePMMM を使って ParticleSystem 型のオブジェクトに書き戻される。

Listing 73: PM3 による力の計算

---

```
1 pm3.calcForceAllAndWriteBack(tree_pm3, domain_info, ptcl);
```

---

### 6.3.7 コンパイル方法，実行方法

コンパイル時には Makefile の FDPS\_ROOT, PM3\_ROOT, FFTW\_ROOT を適宜編集する。PM 法による比較も行う場合は, PM\_ROOT を編集し, また use\_PM を true に設定する。Makefile を編集後 make を実行すると, 実行ファイル main.out が生成される。main.out はコマンドラインオプションにより, 条件を設定する事ができる。コマンドラインオプションは以下の通りである。

- -n: 粒子数
- -t: PM3 で使うツリーのオープニングアングル
- -c: PM3 の計算領域を分割するメッシュの数 (一次元方向)
- -C: ツリー法で計算する隣接セルの数 (一次元方向。1 を指定すると近傍セル数が 27 となる。)

- -r: 負の電荷の割合 . (e.g. 0.5 で中性)

以下にコンパイルおよび実行方法を記載する .

```
$ cd (FDPS)/sample/c++/PMMM/accuracy_check
$ make
$ OMP_NUM_THREADS=2 mpiexec -n 4 ./main.out -n 4096 -t 0.1 -r 0.5
```

実行すると , カレントディレクトリに `result.dat` ファイルが出力される . このファイルは Ewald 法と比較した場合 , PM<sup>3</sup> の加速度とポテンシャルの相対差が格納される . 1 列目は 累積分布であり , 2 列目は  $p=0$  の時の  $\frac{|\nabla\phi_{PM^3} - \nabla\phi_{Ewald}|}{|\nabla\phi_{Ewald}|}$  , 3 列目は  $\frac{\phi_{PM^3} - \phi_{Ewald}}{\phi_{Ewald}}$  である . ここで ,  $\phi$  はポテンシャルであり , 下添え字は計算方法を示す . 以下同様に  $p=1$  の時の値は 4,5 列目に ,  $p=2$  の時の値は 6, 7 列目に書き込まれる .  $p=7$  までの計算を行うので , 17 列目まで値が outputされる . PM 法有効にした場合には 18 列目に  $\frac{|\nabla\phi_{PM} - \nabla\phi_{Ewald}|}{|\nabla\phi_{Ewald}|}$  の値が表示される . PM 法ではポテンシャルの値は計算されないので , ポテンシャルの相対差は出力されない .

### 6.3.8 結果の確認

前節の計算を行った場合の結果を図 5 に示す . ここでは , gnuplot を使って , 以下のよう なコマンドで出力した結果である .

```
gnuplot> set log y
gnuplot> set grid
gnuplot> pl "result.dat" u 1:2 ti "p=0" w l, "" u 1:4 ti "p=1" w l, \
"" u 1:6 ti "p=2" w l, "" u 1:8 ti "p=3" w l, "" u 1:10 ti "p=4" w l, \
"" u 1:12 ti "p=5" w l, "" u 1:14 ti "p=6" w l, "" u 1:16 ti "PM, 256^3" w l
gnuplot> exit
```

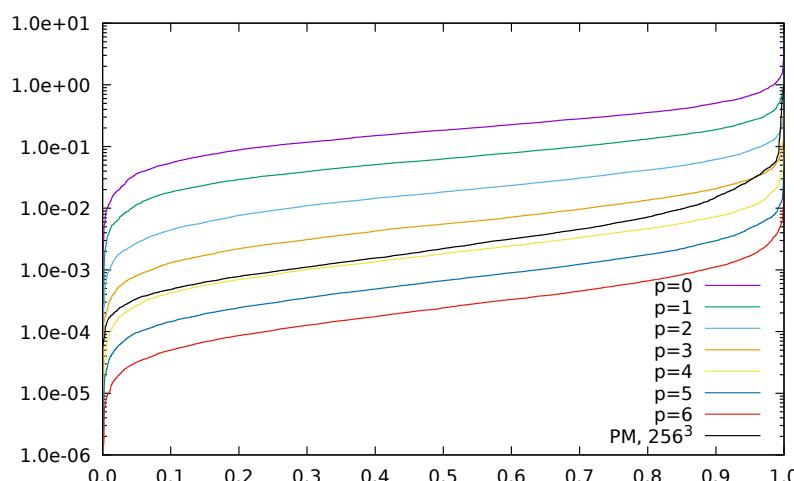


図 5: PM 法 , PM<sup>3</sup> の比較 . 縦軸は Ewald 法で計算したポテンシャル勾配との相対誤差を示す . PM<sup>3</sup> ではメッシュ数を 8<sup>3</sup> , 隣接セル数を 27 として計算している .

## 6.4 PM<sup>3</sup> を用いた宇宙論の計算

本節では、PM<sup>3</sup> を用いた宇宙論的  $N$  体シミュレーションのサンプルコードの解説を行う。シミュレーションの内容は節 6.2 で説明したものと同じであるが、周期境界条件による、遠方のイメージセルからの力の寄与を PM 法でなく PM<sup>3</sup> で計算する点が異なる。

### 6.4.1 サンプルコードの場所と作業ディレクトリ

サンプルコードの場所は、\$(FDPS)/sample/c++/pm3/cosmology である。まずは、そこに移動する。下に示すように、サンプルコードは複数のファイルから構成される。この内、FDPS に関係した部分は主に pmmm.hpp と pmmm.cpp に実装されている。以下の説明では、適宜、ファイル名を参照していく。

```
$ cd $(FDPS)/sample/c++/pm3/cosmology
$ ls | awk '{print $0}'
IC/
Makefile
README_en.txt
README_ja.txt
constants.hpp
cosmology.hpp
fig/
result/
run_param.hpp
pmmm.cpp
pmmm.hpp
```

### 6.4.2 ヘッダファイルのインクルード

FDPS の標準機能と拡張機能の両方を使うため、メイン関数が定義されたファイル pmmm.cpp で、particle\_simulator.hpp と particle\_mesh\_multipole.hpp をインクルードしている:

Listing 74: Include FDPS

---

```
1 #include <particle_simulator.hpp>
2 #include <particle_mesh_multipole.hpp>
```

---

### 6.4.3 ユーザー定義クラス

FDPS を使用するため、ユーザはユーザ定義クラスを実装しなければならない。本節では、ユーザ定義クラスをサンプルコードでどのように実装しているかを説明する。

### 6.4.3.1 FullParticle 型

ユーザーは FullParticle 型を記述しなければならない。FullParticle 型には、計算を行うにあたり、粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている必要がある。Listing 75 に、サンプルコードの FullParticle 型を示す。このサンプルコードでは通常の  $N$  体計算に必要なメンバ変数 (`id`, `mass`, `eps`, `pos`, `vel`, `acc`) に加え、ハップル定数を格納する `H0`、計算領域の大きさを  $Mpc h^{-1}$  単位で格納する `Lbnd` が用意されている。また、FDPS の標準機能・拡張機能を使うため、以下のメンバ関数を持たせる必要がある:

- `getCharge()` — FDPS が粒子の質量を取得するのに必要
- `getPos()` — FDPS が粒子座標を取得するのに必要
- `setPos()` — FDPS が粒子の座標を書き込むのに必要
- `copyFromForce()` — Force 型から結果をコピーするのに必要なメンバ関数
- `copyFromForcePMM()` — PM<sup>3</sup> モジュールが力の計算結果を書き込むために必要

さらに、FDPS の入出力関数を使用するため、以下のメンバ関数を定義してある：

- `readBinary()`
- `writeBinary()`

但し、この 2 つは必須ではなく、ユーザ独自の入出力関数を定義してもよい。

Listing 75: FullParticle 型

---

```

1 class FP {
2     template <class T>
3     T reverseEndian(T value) {
4         char *first = reinterpret_cast<char *>(&value);
5         char *last = first + sizeof(T);
6         std::reverse(first, last);
7         return value;
8     }
9
10    public:
11        PS::S64 id;
12        PS::F64 mass;
13        static inline PS::F64 eps = 0.0;
14        static inline PS::F64 Lbnd = 0.0;
15        static inline PS::F64 H0 = 0.0;
16        PS::F64vec pos;
17        PS::F64vec vel;
18        PS::F64vec acc;
19        PS::F64 pot;
20        PS::F64vec getPos() const { return pos; }
21        PS::F64 getCharge() const { return mass; }
22        void copyFromForce(const Result &f) {
23            this->acc = f.acc;
24            this->pot = f.pot;
25        }
26        void copyFromForcePMM(const Result &f) {
27            this->acc = f.acc;
28            this->pot = f.pot;

```

```

29 }
30 void setPos(const PS::F64vec &pos_new) { this->pos = pos_new; }
31 void clear() {
32     this->acc = 0.0;
33     this->pot = 0.0;
34 }
35 PS::F64 calcDtime(run_param &this_run) {
36     PS::F64 dtime_v, dtime_a, dtime;
37     PS::F64 vnorm, anorm;
38     vnorm = sqrt(SQR(this->vel)) + TINY;
39     anorm = sqrt(SQR(this->acc)) + TINY;
40     dtime_v = this->eps / vnorm;
41     dtime_a = sqrt(this->eps / anorm) * CUBE(this_run.anow);
42     dtime = fmin(0.5 * dtime_v, dtime_a);
43     return dtime;
44 }
45 void writeParticleBinary(FILE *fp) {
46     PS::F32 x = pos[0];
47     PS::F32 y = pos[1];
48     PS::F32 z = pos[2];
49     PS::F32 vx = vel[0];
50     PS::F32 vy = vel[1];
51     PS::F32 vz = vel[2];
52     PS::S32 i = id;
53     PS::S32 m = mass;
54     fwrite(&x, sizeof(PS::F32), 1, fp);
55     fwrite(&vx, sizeof(PS::F32), 1, fp);
56     fwrite(&y, sizeof(PS::F32), 1, fp);
57     fwrite(&vy, sizeof(PS::F32), 1, fp);
58     fwrite(&z, sizeof(PS::F32), 1, fp);
59     fwrite(&vz, sizeof(PS::F32), 1, fp);
60     fwrite(&m, sizeof(PS::F32), 1, fp);
61     fwrite(&i, sizeof(PS::F32), 1, fp);
62 }
63
64 // for API of FDPS
65 // in snapshot, L unit is Mpc/h, M unit is Msun, v unit is km/s
66 void readBinary(FILE *fp) {
67     static PS::S32 ONE = 1;
68     static bool is_little_endian = *reinterpret_cast<char*>(&ONE) ==
69         ONE;
70     static const PS::F64 Mpc_m = 3.08567e22;    // unit is m
71     static const PS::F64 Mpc_km = 3.08567e19;    // unit is km
72     static const PS::F64 Msun_kg = 1.9884e30;    // unit is kg
73     static const PS::F64 G = 6.67428e-11;        // m^3*kg^-1*s^-2
74     static const PS::F64 C1 = 1.0 / FP::Lbnd;
75     static const PS::F64 Cv = 1.0 / (FP::Lbnd * FP::H0);
76     static const PS::F64 Cm = 1.0 / (pow(Mpc_m * FP::Lbnd, 3.0) / pow(
77         Mpc_km / FP::H0, 2.0) / G / Msun_kg);
78     PS::F32 x, y, z, vx, vy, vz, m;
79     PS::S32 i;
80
81     auto ret = fread(&x, 4, 1, fp);
82     (void)ret;
83     ret = fread(&vx, 4, 1, fp);

```

```

82         ret = fread(&y, 4, 1, fp);
83         ret = fread(&vy, 4, 1, fp);
84         ret = fread(&z, 4, 1, fp);
85         ret = fread(&vz, 4, 1, fp);
86         ret = fread(&m, 4, 1, fp);
87         ret = fread(&i, 4, 1, fp);
88         if (is_little_endian) {
89             pos.x = x * Cl;
90             pos.y = y * Cl;
91             pos.z = z * Cl;
92             vel.x = vx * Cv;
93             vel.y = vy * Cv;
94             vel.z = vz * Cv;
95             mass = m * Cm;
96             id = i;
97         } else {
98             pos.x = reverseEndian(x) * Cl;
99             pos.y = reverseEndian(y) * Cl;
100            pos.z = reverseEndian(z) * Cl;
101            vel.x = reverseEndian(vx) * Cv;
102            vel.y = reverseEndian(vy) * Cv;
103            vel.z = reverseEndian(vz) * Cv;
104            mass = reverseEndian(m) * Cm;
105            id = reverseEndian(i);
106        }
107    }
108
109 // for API of FDPS
110 void writeBinary(FILE *fp) {
111     static const PS::F64 Mpc_m = 3.08567e22;      // unit is m
112     static const PS::F64 Mpc_km = 3.08567e19;     // unit is km
113     static const PS::F64 Msun_kg = 1.9884e30;     // unit is kg
114     static const PS::F64 G = 6.67428e-11;          // m^3*kg^-1*s^-2
115     static const PS::F64 Cl = FP::Lbnd;
116     static const PS::F64 Cv = (FP::Lbnd * FP::H0);
117     static const PS::F64 Cm = (pow(Mpc_m * FP::Lbnd, 3.0) / pow(Mpc_km
118                               / FP::H0, 2.0) / G / Msun_kg);
119     PS::F32vec x = pos * Cl;
120     PS::F32vec v = vel * Cv;
121     PS::F32 m = mass * Cm;
122     PS::S32 i = id;
123     fwrite(&x.x, sizeof(PS::F32), 1, fp);
124     fwrite(&v.x, sizeof(PS::F32), 1, fp);
125     fwrite(&x.y, sizeof(PS::F32), 1, fp);
126     fwrite(&v.y, sizeof(PS::F32), 1, fp);
127     fwrite(&x.z, sizeof(PS::F32), 1, fp);
128     fwrite(&v.z, sizeof(PS::F32), 1, fp);
129     fwrite(&m, sizeof(PS::F32), 1, fp);
130     fwrite(&i, sizeof(PS::S32), 1, fp);
131 }
132 void writeAscii(FILE *fp) {
133     fprintf(fp, "%ld\t%e\t%e\t%e\t%e\t%e\t%e\t%e\t%e\t%e\t%e\t%e\n",
134             this->id, this->mass, this->pos.x, this->pos.y, this->pos.z,
135             this->vel.x,
136             this->vel.y, this->vel.z, this->acc.x, this->acc.y, this->

```

---

```

134     }
135 };

```

---

#### 6.4.3.2 EssentialParticleI 型

ユーザーは EssentialParticleI 型を記述しなければならない。EssentialParticle 型には、PP パートの Force 計算を行う際、 $i$  粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 76 に、サンプルコードの EssentialParticleI 型を示す。この EssentialParticleI 型には、FullParticle 型から値をコピーするのに必要なメンバ関数 copyFromFP() と、EssentialParticleI 型の粒子座標を返すメンバ関数 getPos() を持たせる必要がある。

Listing 76: EssentialParticleI 型

---

```

1 struct EPI {
2     PS::S64 id;
3     PS::F64vec pos;
4     PS::F64vec getPos() const { return this->pos; }
5     void copyFromFP(const FP &fp) {
6         this->id = fp.id;
7         this->pos = fp.pos;
8     }
9 };

```

---

#### 6.4.3.3 EssentialParticleJ 型

ユーザーは EssentialParticle 型を記述しなければならない。EssentialParticle 型には、PP パートの Force 計算を行う際、 $j$  粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 77 に、サンプルコードの EssentialParticleJ 型を示す。この EssentialParticleJ 型には、FullParticle 型から値をコピーするのに必要なメンバ関数 copyFromFP() と、EssentialParticleI 型と同様に copyFromFP() と getPos() が必要である。さらに、粒子の質量を返す getCharge() および、粒子の座標を設定する setPos() も必要である。

Listing 77: EssentialParticleJ 型

---

```

1 struct EPJ {
2     PS::S64 id;
3     PS::F64vec pos;
4     PS::F64 mass;
5     PS::F64vec getPos() const { return this->pos; }
6     void copyFromFP(const FP &fp) {
7         this->id = fp.id;
8         this->mass = fp.mass;
9         this->pos = fp.pos;
10    }
11    PS::F64 getCharge() const { return this->mass; }
12    void setPos(const PS::F64vec &pos_new) { this->pos = pos_new; }
13 };

```

---

#### 6.4.3.4 Force型

ユーザーは Force 型を記述しなければならない。Force 型は、PP パートと PM<sup>3</sup> パートで計算され得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。本サンプルコードの Force 型を Listing 78 に示す。Force 型には加算対象のメンバ変数を 0 ないし初期値に設定するための関数 clear() と、pp パートで計算された力に、PM<sup>3</sup> パートで計算された値を加算するための関数 addForcePMMM(const PS::F64vec, const PS::F64) が必要になる。

Listing 78: Force 型

---

```

1 struct Result {
2     PS::F64vec acc;
3     PS::F64 pot;
4     void clear() {
5         acc = 0.0;
6         pot = 0.0;
7     }
8     void addForcePMMM(const PS::F64vec &f, const PS::F64 p) {
9         this->acc += f;
10        this->pot -= p;
11    }
12 };

```

---

#### 6.4.3.5 相互作用関数

ユーザーは相互作用関数を記述しなければならない。ここでは、サンプルコードの CalcGravity を Listing 79 に示す。また、PIKG を使用するかどうかに応じて（マクロ定義 ENABLE\_PIKG で判定している）、場合分けして実装されている。いずれの場合でも、ファンクタの引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。

Listing 79: 相互作用関数

---

```

1 #if defined(ENABLE_PIKG)
2 struct Epi {
3     PS::F32vec pos;
4 };
5 struct Epj {
6     PS::F32vec pos;
7     PS::F32 mass;
8 };
9 struct Force {
10     PS::F32vec acc;
11     PS::F32 pot;
12 };
13
14 #include "kernel_pikg.hpp"
15
16 template <class TParticleJ>
17 struct CalcGravity {
18     void operator()(const EPI *ep_i, const PS::S32 n_ip, const TParticleJ
19                      *ep_j, const PS::S32 n_jp, Result *force) {

```

```

19     Epi epi[n_ip];
20     Force f[n_ip];
21     for (int i = 0; i < n_ip; i++) {
22         epi[i].pos = (PS::F32vec)(ep_i[i].getPos() - ep_i[0].getPos())
23             ;
24         f[i].acc = force[i].acc;
25         f[i].pot = force[i].pot;
26     }
27     Epj epj[n_jp];
28     for (int i = 0; i < n_jp; i++) {
29         epj[i].pos = (PS::F32vec)(ep_j[i].getPos() - ep_i[0].getPos())
30             ;
31         epj[i].mass = ep_j[i].getCharge();
32     }
33     CalcGravityEpEp(FP::eps * FP::eps)(epi, n_ip, epj, n_jp, f);
34     for (int i = 0; i < n_ip; i++) {
35         force[i].acc = f[i].acc;
36         force[i].pot = f[i].pot;
37     }
38 }
39 #else // ENABLE_PIKG
40
41 template <class TPJ>
42 struct CalcGravity {
43     void operator()(EPI *ep_i, const PS::S32 n_ip, TPJ *ep_j, const PS::
44         S32 n_jp, Result *result) {
45         PS::F64 eps2 = FP::eps * FP::eps;
46         for (PS::S32 i = 0; i < n_ip; i++) {
47             PS::F64vec xi = ep_i[i].getPos();
48             PS::F64vec Mgrad = 0.0;
49             PS::F64 poti = 0.0;
50             for (PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++) {
51                 PS::F64vec rij = xi - ep_j[j].getPos();
52                 if (rij.x == 0.0 && rij.y == 0.0 && rij.z == 0.0) continue
53                     ;
54                 PS::F64 r3_inv = rij * rij + eps2;
55                 PS::F64 r_inv = 1.0 / sqrt(r3_inv);
56                 r3_inv = r_inv * r_inv;
57                 r_inv *= ep_j[j].getCharge();
58                 r3_inv *= r_inv;
59                 Mgrad += r3_inv * rij;
60                 poti += r_inv;
61             }
62             result[i].acc -= Mgrad;
63             result[i].pot -= poti;
64         }
65     }
66 #endif // ENABLE_PIKG

```

PM<sup>3</sup> の PP パートの計算は , TreePM 法と違い , 近傍セルの粒子との相互作用を計算するだけであり滑らかなカットオフ関数不要である . また , FDPS は近傍セルの粒子のみからな

る相互作用リストを生成するので、ユーザはカットオフについて考える必要はない。

#### 6.4.4 プログラム本体

本節では、サンプルコード本体について解説を行う。詳細な説明に入る前に、サンプルコードの内容と全体構造について説明を与える。??節冒頭で述べたように、このサンプルコードでは宇宙論的  $N$  体シミュレーションを PM<sup>3</sup> 法を用いて実行する。初期条件としては、以下の 3 つの場合に対応している：

- (a) Santa Barbara Cluster Comparison Test (Frenk et al.[1999, ApJ, 525, 554]) で用いられた初期条件 (<https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzwW5XAYwfqZYQ?path=%2Fsb>) から初期条件を入手可能。ファイル `ic_sb128.tar` は粒子数  $128^3$  のデータ、ファイル `ic_sb256.tar` は粒子数  $256^3$  のデータ)
- (b) 上記テストで用いられた初期条件ファイルと同じフォーマットで記述された初期条件
- (c) ランダムにおいて粒子分布

実行時のコマンドライン引数として初期条件を指定した後、初期条件ファイル内で指定された終了時刻（赤方偏移  $z$ ）まで、PM<sup>3</sup> 法で粒子の運動を計算する。各初期条件に対応したパラメータファイルのファイルフォーマットについては、\$(FDPS)/sample/c++/treepm/README\_ja.txt で説明されているので、そちらを参照されたい。また、\$(FDPS)/sample/c++/treepm/result/input para に、(a) の場合のパラメータファイルの記述例があるので、そちらも参照されたい。

コード全体の構造は以下のようになっている：

- (1) FDPS で使用するオブジェクトの生成と初期化
- (2) 初期条件ファイルの読み込み
- (3) 終了時刻まで粒子の運動を計算

以下で、個々について詳しく説明を行う。

##### 6.4.4.1 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メイン関数に記述する。

Listing 80: FDPS の開始

---

```
1 PS::Initialize(argc, argv);
```

---

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メイン関数の最後に次のように記述する。

Listing 81: FDPS の終了

---

```
1 PS::Finalize();
```

---

#### 6.4.4.2 オブジェクトの生成と初期化

FDPS の初期化に成功した場合 , ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある . 本節では , オブジェクトの生成 / 初期化の仕方について , 解説する .

##### 6.4.4.2.1 オブジェクトの生成

PM<sup>3</sup> の計算では , 粒子群クラス , 領域クラス , PP パートの計算で使用する tree を 1 本 , そして、 PM<sup>3</sup> パートの計算に必要な PMMM オブジェクトの生成が必要である . 本サンプルコードでは , pmmm.cpp のメイン関数内でオブジェクトの生成が行われている :

Listing 82: オブジェクトの生成

---

```

1 PS::ParticleSystem<FP> ptcl_pm3;
2 PS::DomainInfo domain_info;
3 PS::TreeForForce<PS::SEARCH_MODE_LONG_PARTICLE_MESH_MULTIPOLE, Result, EP,
   EP, PS::MomentMonopole, PS::MomentMonopole, PS::SPJMonopole>
   treepm3;
4 PS::PMMM::ParticleMeshMultipole<Result, EP> pm3;
```

---

上記はサンプルコードからオブジェクト生成部分だけを抜き出してきたものであることに注意されたい . PM<sup>3</sup> オブジェクト生成時にはテンプレート引数として treepm3 で使用している EssentialParticleI 型と Force 型を指定する必要がある事に注意されたい .

##### 6.4.4.2.2 オブジェクトの初期化

ほとんどの FDPS のオブジェクトは , 生成後 , 初期化してから使用する必要がある . これらのメソッドは initialize メソッドで初期化を行う . 以下に , サンプルコードでのオブジェクトの初期化を示す :

Listing 83: オブジェクトの初期化

---

```

1 // Initialize ParticleSystem
2 ptcl_pm3.initialize();
3 // Initialize DomainInfo
4 domain_info.initialize();
5 domain_info.setBoundaryCondition(PS::BOUNDARY_CONDITION_PERIODIC_XYZ);
6 domain_info.setPosRootDomain(PS::F64vec(0.0, 0.0, 0.0), PS::F64vec(1.0,
   1.0, 1.0));
7 // Initialize Tree
8 treepm3.initialize(3*ptcl_pm3.getNumberOfParticleGlobal(), this_run.theta)
   ;
9 PS::S32 n_cell = 8;
10 PS::S32 i_cut = 2;
11 treepm3.setParamPMMM(n_cell, i_cut);
12 // Initialize Tree
13 pm3.initialize(p_exp, p_spj2mm);
```

---

粒子群クラスのオブジェクトの初期化は , 単に initialize メソッドを引数無しで呼び出すだけである . 領域クラスに関しては , initialize メソッド呼び出し後に , 境界条件と境

界の大きさを指定する必要がある。これらはそれぞれ `setBoundaryCondition` メソッドと `setPosRootDomain` メソッドで行う。

ツリーオブジェクトの初期化の際には、`initialize` メソッドに計算で使用する大雑把な粒子数を第1引数として渡す必要がある。本サンプルコードでは、全粒子数の3倍の値を渡している。第2引数には、tree法で力の計算を行う際の opening angle criterion  $\theta$  を指定する。本サンプルコードでは、 $\theta$  をはじめとした、計算を制御するパラメータ群を構造体 `this_run` のメンバ変数としてまとめている。その後、PM<sup>3</sup> モジュールを使用する場合は `setParamPMMM` メソッドを呼び出して、第1引数に PM セルの一次元方向の数、第2引数に近傍セルの範囲を指定する必要がある。ここでは、PM セルの数は  $8^3 = 512$ 、近傍セルの数は  $(2 \times 2 + 1)^3 = 125$  となる。

`pm3` の初期化には `initialize` メソッドを用いて行う。この時に第1引数に PM<sup>3</sup> の多重局展開次数、第2引数に SPJ から多重極子を作る際に考慮する SPJ が持つ多重極子の最大次数を指定する。

#### 6.4.4.3 初期条件の設定

初期条件を指定するパラメータファイルの読み込みは、メイン関数で呼ばれる関数 `read_param_file()` 内で行われる:

---

```
1 read_param_file(ptcl_pm3, this_run, argv[1]);
```

---

この関数ではプログラム実行時に指定されたパラメータファイルを読み込み、粒子群クラスのオブジェクト `ptcl_pm3` に粒子データをセットする。サンプルコードでは、この後、FDPS の API を使って、領域分割と粒子交換を行っている。以下でこれらの API について解説する。

#### 6.4.4.3.1 領域分割の実行

粒子分布に基いて領域分割を実行するには、領域クラスの `decomposeDomainAll` メソッドを使用する:

Listing 84: 領域分割の実行

---

```
1 domain_info.decomposeDomainAll(ptcl_pm3);
```

---

ここで、粒子分布の情報を領域クラスに与えるため、引数に粒子群クラスのオブジェクトが渡されていることに注意されたい。この領域分割はメイン関数内で行われている。

#### 6.4.4.3.2 粒子交換の実行

領域情報に基いてプロセス間の粒子の情報を交換するには、粒子群クラスの `exchangeParticle` メソッドを使用する:

Listing 85: 粒子交換の実行

---

```
1 ptcl_pm3.exchangeParticle(domain_info);
```

---

ここで領域情報を粒子群クラスに与えるため，引数に領域クラスのオブジェクトが渡されていることに注意する．

#### 6.4.4.4 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が完了したら，計算開始時の加速度を決定するため，相互作用計算を行う必要がある．以下に，本サンプルコードでの相互作用計算の実装を示す．本サンプルコードでは，PP パートの計算にはツリーオブジェクトの `calcForceAllAndWriteBack` メソッドを使用している．このメソッドを実行することで，粒子群オブジェクトのメンバ変数 `acc` に PP パートの加速度が格納される．PM パートの計算には PM<sup>3</sup> オブジェクトの `calcForceAllAndWriteBack` メソッドを使用している．これによって，PM パートで計算された加速度とポテンシャルが `ptcl_pm3` の `acc` に加算される．引数として `tree_pm3` を渡すことで，PM<sup>3</sup> パートの計算に必要なツリー構造や多重極展開の係数を使用することができる．

Listing 86: 相互作業計算の実行

---

```

1 /* PP part
2 treepm3.calcForceAllAndWriteBackVA(CalcGravity<EP>(), CalcGravity<PS:::
3     SPJMonopole>(), ptcl_pm3, domain_info);
4
5 /* PM part
5 pm3.calcForceAllAndWriteBack(tree_pm3, domain_info, ptcl_pm3);
```

---

#### 6.4.4.5 時間積分ループ

本サンプルコードでは，時間積分を Leapfrog 時間積分法によって行っている（この方法に関しては，4.1.3.4.4 節を参照されたい）．オリジナルの実装では近傍セルからの寄与は粒子粒子位置を時間推進する  $D(\cdot)$  オペレータは関数 `drift_ptcl`，粒子速度を時間推進する  $K(\cdot)$  オペレータは関数 `kick_ptcl` として実装されている．宇宙膨張の効果は関数 `kick_ptcl` 内で考慮されている．また，スケールファクターやハップルパラメータの時間発展は構造体 `this_run` のメンバ関数 `update_expansion` で計算されている．

#### 6.4.5 コンパイル

`READMEja.txt` で説明されているように，`Makefile` を適宜編集し，`make` コマンドを実行することでコンパイルすることができる．TreePM コード同様，本サンプルコードでも FFTW ライブラリを使用するため，ユーザ自身でインストールする必要がある．コンパイルが成功すれば，実行ファイル `pmmm.out` が作成されているはずである．

#### 6.4.6 実行

以下では `santa barbara cluster comparison test` の初期条件を用いて，PM<sup>3</sup> 法で計算を実行する方法を説明する．まず、IC ディレクトリに移動し、以下のように初期条件ファイルをダウンロードする．

```
$ cd IC
$ bash download.sh
```

すると、ファイル particles\_ic\_sb128 がダウンロードされる。これは粒子数  $128^3$  の初期条件であり、 $256^3$  の初期条件を用いる場合は、download.sh 内の ic\_sb128.tar を ic\_sb256.tar に置き換えればよい。その後、result/input.para というパラメータファイルが IC/particles\_ic\_sb128 を用いて計算するためのパラメータファイルであるので、以下のようにすればよい。

```
$ cd ../result
$ OMP_NUM_THREADS=2 mpexec -n 4 ../pmmm.out input.para
```

これで、スレッド数 2、プロセス数 4 で粒子数が  $128^3$  の宇宙論的シミュレーションが実行される。

#### 6.4.7 結果の確認

計算が終了するとパラメータファイルで指定されたディレクトリに計算結果が出力されるはずである。最後の時刻の結果を gnuplot で可視化するには、以下のようにすればよい。

```
$ cd ../fig
$ gnuplot cosmo.gpl
```

すると、cosmo.pdf というファイルが生成されるので、適当な pdf ビューアで開くことで計算結果の確認ができる。

図 6 は、節 6.2 と同じ初期条件（粒子数  $256^3$ ）での  $PM^3$  を用いた時の計算結果を示す。ほぼ同じ結果が再現できていることが確認できる。

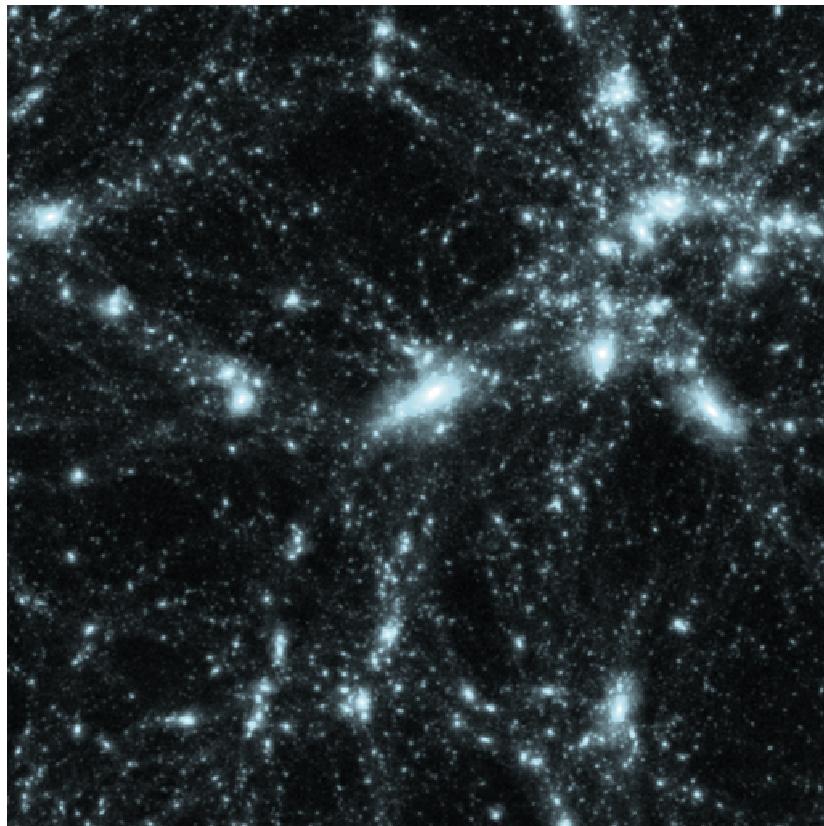


図 6: 図 4 と同じ初期条件の下で  $\text{PM}^3$  法を用いて計算した結果 .

## 7 より実用的なアプリケーションの解説

前節までは、比較的単純なサンプルコードを用いて、FDPS の基本的な機能について解説を行ってきた。しかしながら、実際の研究では、複数の粒子種の取り扱いが必要になる等、より複雑なアプリケーションを書く必要がある。そこで、本節では、より実用的なサンプルコードを使って、FDPS の他の機能について解説を行う。記述を簡潔にするため、読者は前節までの内容を理解しているものと仮定する。

### 7.1 $N$ 体/SPH コード

本節では、より実用的なアプリケーションの一例として円盤銀河の時間発展を計算する  $N$  体/SPH サンプルコードの解説を行う。このサンプルコードは、重力のみで相互作用するダークマターと星を  $N$  体粒子、重力及び流体相互作用を行うガスを SPH 粒子として表現する。重力計算は Tree 法で、流体計算は SPH 法を用いて行う。SPH 法は Springel & Hernquist [2002, MNRAS, 333, 649] 及び Springel [2005, MNRAS, 364, 1105] で提案された方法（以下、簡単のため、Springel の方法と呼ぶ）を使用している。本解説を読むことにより、ユーザは、FDPS で複数の粒子種を扱う方法を学ぶことができる。

以下では、まずははじめにコードの使用方法について説明を行う。次に Springel の方法について簡単な解説を行った後、サンプルコードの中身について具体的に解説する。

#### 7.1.1 コードの使用方法

前節で述べた通り、本コードは円盤銀河の  $N$  体/SPH シミュレーションを行うコードである。ダークマターと星の初期条件は、銀河の初期条件を作成するソフトウェア MAGI (Miki & Umemura [2018, MNRAS, 475, 2269]) で作成したファイルを読み込んで設定する。一方、ガスの初期条件は本コードの内部で作成する。したがって、以下の手順で本コードを使用する。

- ディレクトリ \$(FDPS)/sample/c++/nbody+sph に移動
- カレントディレクトリにある Makefile を編集
- MAGI を使って初期条件に対応する粒子データを生成し、./magi\_data/dat 以下に配置
- コマンドライン上で make を実行
- nbodysph.out ファイルの実行
- 結果の解析

以下、順に説明していく。

### 7.1.1.1 ディレクトリ移動

サンプルコードの場所は、\$(FDPS)/sample/c++/nbody+sphである。まずは、そこに移動する。

### 7.1.1.2 サンプルコードのファイル構成

以下はサンプルコードのファイル構成である。

```
$ ls | awk '{print $0}'
Makefile
Makefile.K
Makefile.ofp
ic.hpp
job.K.sh
job.ofp.sh
leapfrog.hpp
macro_defs.hpp
magi_data/
main.cpp
mathematical_constants.cpp
mathematical_constants.h
physical_constants.cpp
physical_constants.h
test.py*
user_defined.hpp
```

各ソースファイルの内容について簡単に解説を行う。まず、ic.hppには初期条件を作成する関数が実装されている。初期条件は円盤銀河の他、複数用意されている（後述）。leapfrog.hppには粒子の軌道の時間積分を Leapfrog 法を用いて行う関数が実装されている。macro\_defs.hppには計算を制御するためのマクロが定義されている。main.cppはアプリケーションのメインルーチンが実装されている。mathematical\_constants.h 及び mathematical\_constants.cpp には数学定数が、physical\_constants.h 及び physical\_constants.cpp には物理定数が定義されている。user\_defined.hppには、ユーザ定義クラスや相互作用関数が実装されている。

ディレクトリ magi\_data には、銀河の初期条件を作成するソフトウェア MAGI に入力するパラメータファイル (magi\_data/cfg/\*) と MAGI を動作させるスクリプト (magi\_data/sh/run.sh) が格納されている。

### 7.1.1.3 Makefile の編集

Makefile の編集項目は以下の通りである。

- 変数 CXX に使用する C++コンパイラを代入する。
- 変数 CXFLAGS に C++コンパイラのコンパイルオプションを指定する。
- 本コードでは計算を制御するためにいくつかのマクロを用意している。表 1 にマクロ名とその定義の対応を示した。また、本コードには、INITIAL\_CONDITION の値に応じて自動的に設定されて使用されるマクロも存在する。これらは一般に変更する必要はないが、詳細は `macro_defs.h` を参照して頂きたい。
- 本コードでは重力計算に x86 版 Phantom-GRAPE ライブラリを使用することができる。Phantom-GRAPE ライブラリを使用する場合、`Makefile` の変数 `use_phantom_grape_x86` の値を `yes` にする。

OpenMP や MPI の使用/不使用の指定に関しては、第 3 節を参照して頂きたい。

マクロ名	定義
INITIAL_CONDITION	初期条件の種類の指定、或いは、コードの動作の指定に使用されるマクロ。0から3までのいずれかの値を取る必要がある。値に応じて、次のように指定される。0:円盤銀河の初期条件を選択、1:Cold collapse 問題の初期条件を選択、2:Evrard test 問題の初期条件を選択、3:ガラス状に分布したSPH粒子データを生成するモードで実行ファイルを作成
ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH	smoothing length が可変/固定を制御するマクロ。定義されている場合、可変となり Springel の方法で SPH 計算が行われる。未定義の場合、固定長カーネルの SPH コードとなる。
USE_ENTROPY	流体の熱力学状態を記述する独立変数としてエントロピーを使うか単位質量あたりの内部エネルギーを使用するかを指定するマクロ。定義されている場合エントロピーが用いられる。但し、後述するマクロ ISOTHERMAL_EOS が定義されている場合には、単位質量あたりの内部エネルギーが強制的に使用される(圧力の計算に内部エネルギーを使用する)。
USE_BALSARA_SWITCH	Balsara switch ( <a href="#">Balsara [1995, JCP, 121, 357]</a> ) の使用/不使用を制御するマクロ。定義されている場合は使用する。
USE_PRESCR_OF_THOMAS_COUCHMAN_1992	<a href="#">Thomas &amp; Couchman [1992, MNRAS, 257, 11]</a> で提案された SPH 計算の tensile 不安定を防ぐ簡単な方法を使用するかを制御するマクロ。定義されている場合は使用する。
ISOTHERMAL_EOS	流体を等温で取り扱うかどうかを指定するマクロ。定義されている場合は等温で扱い、未定義の場合にはエントロピー方程式、或いは、内部エネルギー方程式が解いて、熱力学的状態を時間発展させる。
READ_DATA_WITH_BYTESWAP	MAGI の粒子データを読み込む際に基本データ型単位で byteswap してデータを読み込むかを制御するマクロ。定義されている場合は byteswap する。

表 1: コンパイル時マクロの種類と定義

### 7.1.1.4 MAGI を使った粒子データの生成

前述した通り、ユーザは事前に銀河の初期条件を作成するソフトウェア MAGI を使い、以下に指定する手順でデータを作成する必要がある。MAGI を利用できないユーザは、指定するサイトからこちらが用意したデータをダウンロードすることも可能である。以下、各場合について詳しく述べる。

MAGI を使ってデータ作成を行う場合 以下の手順でデータ作成を行う。

1. <https://bitbucket.org/ymiki/magi> から MAGI をダウンロードし、Web の “How to compile MAGI” に記載された手順に従って、適当な場所にインストールする。但し、本サンプルコードは TIPSY ファイルの粒子データ読み込みしかサポートしていないため、MAGI は USE\_TIPSY\_FORMAT=ON の状態でビルドされている必要がある。
2. `./magi_data/sh/run.sh` を開き、変数 MAGI\_INSTALL\_DIR にコマンド `magi` がインストールされたディレクトリを、変数 NTOT に希望する  $N$  体粒子の総数をセットする（ダークマターと星への振り分けは MAGI が自動的に行う）。
3. `./magi_data/cfg/*` を編集し、ダークマターと銀河のモデルを指定する。指定方法の詳細は上記サイトか、或いは、Miki & Umemura [2018, MNRAS, 475, 2269] の第 2.4 節を参照のこと。デフォルトの銀河モデル（以下、デフォルトモデル）は次の 4 成分から構成される：
  - (i) ダークマターハロー（NFW profile,  $M = 10^{12} \text{ M}_\odot$ ,  $r_s = 21.5 \text{ kpc}$ ,  $r_c = 200 \text{ kpc}$ ,  $\Delta_c = 10 \text{ kpc}$ ）
  - (ii) バルジ（King モデル,  $M = 5 \times 10^{10} \text{ M}_\odot$ ,  $r_s = 0.7 \text{ kpc}$ ,  $W_0 = 5$ ）
  - (iii) thick disk (Sérsic profile,  $M = 2.5 \times 10^{10} \text{ M}_\odot$ ,  $r_s = 3.5 \text{ kpc}$ ,  $n = 1.5$ ,  $z_d = 1 \text{ kpc}$ ,  $Q_{T,\min} = 1.0$ ）
  - (iv) thin disk (exponential disk,  $M = 2.5 \times 10^{10} \text{ M}_\odot$ ,  $r_s = 3.5 \text{ kpc}$ ,  $z_d = 0.5 \text{ kpc}$ ,  $Q_{T,\min} = 1.0$ ）

デフォルトモデルでは、2 つの星円盤は bar モードに対してわずかに不安定であるため、弱い棒状構造を持つ渦巻き銀河になることが期待される初期条件となっている。MAGI の最新のリリース（version 1.1.1 [2019 年 7 月 19 日時点]）では、従来のリリースとデフォルトの動作モードが変更されたため、thick disk と thin disk のパラメータ指定の仕方が FDPS 5.0d 以前から変わっていることに注意されたい。具体的には、従来の MAGI では disk 成分の速度分散をパラメータ  $f$  を通して指定する形になっていたが（FDPS 5.0d 以前に付属するサンプルコードでは、 $f = 0.125$ ）、最新のリリースでは Toomre Q value の最小値  $Q_{T,\min}$  を通じて指定する方式になっている。

4. ディレクトリ `magi_data` に移動し、以下のコマンドを実行：

```
$ ./sh/run.sh
```

5. MAGI が正しく終了しているなら、`magi_data/dat` 以下に、拡張子が `tipsy` の粒子データが生成されているはずである。

データをダウンロードする場合 以下のサイトからダウンロードし、`./magi_data/dat/` 以下に置く。各粒子データの銀河モデルはすべてデフォルトモデルで、粒子数だけ異なる。

- $N = 2^{21}$ : [https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi\\_data%2FGalaxy%2F21&files=Galaxy.tipsy](https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi_data%2FGalaxy%2F21&files=Galaxy.tipsy)
- $N = 2^{22}$ : [https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi\\_data%2FGalaxy%2F22&files=Galaxy.tipsy](https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi_data%2FGalaxy%2F22&files=Galaxy.tipsy)
- $N = 2^{23}$ : [https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi\\_data%2FGalaxy%2F23&files=Galaxy.tipsy](https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi_data%2FGalaxy%2F23&files=Galaxy.tipsy)
- $N = 2^{24}$ : [https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi\\_data%2FGalaxy%2F24&files=Galaxy.tipsy](https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi_data%2FGalaxy%2F24&files=Galaxy.tipsy)

### 7.1.1.5 make の実行

`make` コマンドを実行する。

### 7.1.1.6 実行

実行方法は以下の通りである。

- MPI を使用しない場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ ./nbodysph.out
```

- MPI を使用する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ MPIRUN -np NPROC ./nbodysph.out
```

ここで、`MPIRUN` には `mpirun` や `mpiexec` などが、`NPROC` には使用する MPI プロセスの数が入る。

### 7.1.1.7 結果の解析

ディレクトリ `result` に  $N$  体粒子と SPH 粒子の粒子データファイル “`nbody0000x.dat`” と “`sph0000x.dat`” が output される。ここで `x` は時刻に対応する整数である。 $N$  体粒子データの出力フォーマットは、1 列目から順に粒子の ID, 粒子の質量、位置の x, y, z 座標、粒子の x, y, z 軸方向の速度となっている。一方、SPH 粒子データの出力フォーマットは、1 列目か

ら順に粒子の ID、粒子の質量、位置の x, y, z 座標、粒子の x, y, z 軸方向の速度、密度、単位質量あたりの内部エネルギー、エントロピー、圧力となっている。

図 7 は、 $N$  体粒子数  $2^{21}$ 、SPH 粒子数  $2^{18}$  で円盤銀河のシミュレーションを行ったときの  $T = 0.46$  における星分布とガス分布である。

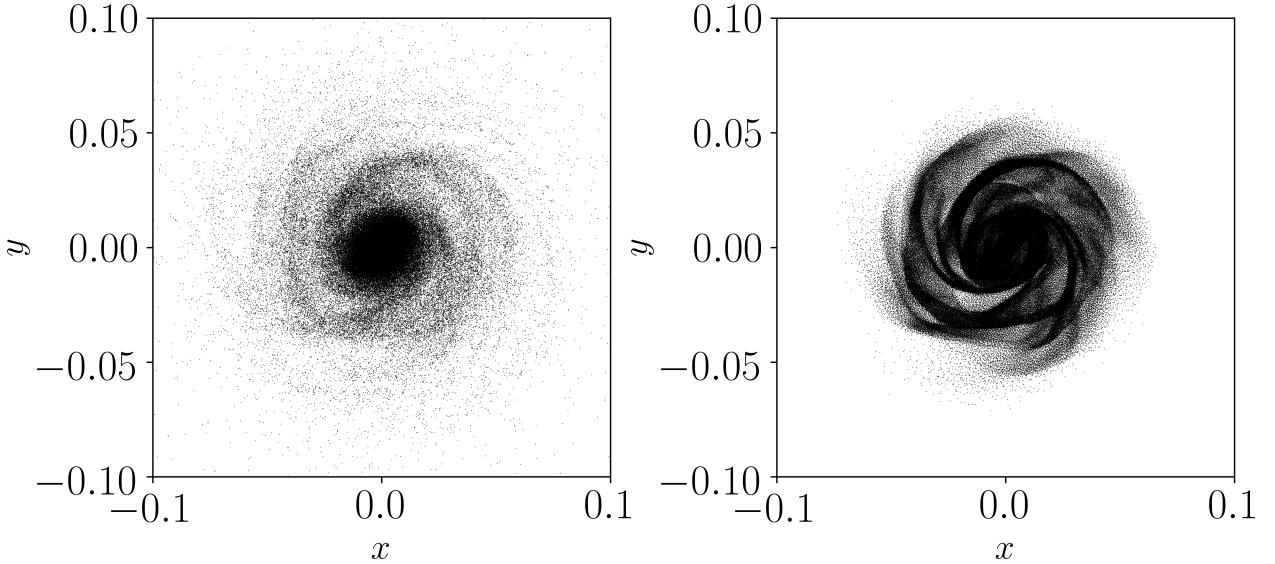


図 7:  $T = 0.46$  における星分布 (左) とガス分布 (右) (計算は以下の条件で実施した:  $N$  体粒子数  $2^{21}$ 、SPH 粒子数  $2^{18}$ 、等温、ガス温度  $10^4$  K、平均分子量  $\mu = 0.5$ )

以下では、まず Springel の方法について解説し、その後、サンプルコードの実装について説明していく。

### 7.1.2 Springel の方法

Springel & Hernquist [2002, MNRAS, 333, 649] では、smoothing length が可変な場合でも、系のエネルギーとエントロピーが保存するようなスキーム（具体的には運動方程式）を定式化した。以下、彼らの定式化を手短に説明する。導出方針としては、smoothing length も独立変数とみて系の Lagrangian を立て、それを粒子数個の拘束条件の下、Euler-Lagrange 方程式を解く、というものである。

具体的には、彼らは系の Lagrangian として次のようなもの選んだ:

$$L(\mathbf{m}q, \dot{\mathbf{m}}q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{m}}r_i^2 - \frac{1}{\gamma - 1} \sum_{i=1}^N m_i A_i \rho_i^{\gamma-1} \quad (26)$$

ここで、 $\mathbf{m}q = (\mathbf{m}r_1, \dots, \mathbf{m}r_N, h_1, \dots, h_N)$  であり、下付きの整数はすべて粒子番号を表す。 $\mathbf{m}r_i$  は位置、 $h_i$  は smoothing length、 $m_i$  は質量、 $\gamma$  は比熱比、 $\rho_i$  は密度、 $A_i$  はエントロピー関数と呼ばれ、単位質量あたりの内部エネルギー  $u_i$  と次の関係がある:

$$u_i = \frac{A_i}{\gamma - 1} \rho_i^{\gamma-1} \quad (27)$$

式 (26) の第 1 項目は運動エネルギー、第 2 項目は内部エネルギーを表す。この Lagrangian をそのまま Euler-Lagrangian 方程式を使って解くと、 $4N$  個の方程式になってしまうので、彼らは次の  $N$  個の拘束条件を導入した。

$$\phi_i = \frac{4\pi}{3} h_i^3 \rho_i - \bar{m} N_{\text{neigh}} = 0 \quad (28)$$

ここで、 $\bar{m}$  は SPH 粒子の平均質量<sup>注 3)</sup>、 $N_{\text{neigh}}$  は近傍粒子数 (定数) である。この拘束条件の下、Lagrange の未定乗数法を使って、Euler-Lagrange 方程式をとけば、以下の運動方程式が得られる:

$$\frac{d\mathbf{m}v_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left[ f_i \frac{P_i}{\rho_i^2} \nabla_i W(r_{ij}, h_i) + f_j \frac{P_j}{\rho_j^2} \nabla_i W(r_{ij}, h_j) \right] \quad (29)$$

ここで、 $P_i$  は圧力、 $r_{ij} = |\mathbf{m}r_i - \mathbf{m}r_j|$ 、 $W$  はカーネル関数、 $f_i$  は  $\nabla h$  term と呼ばれる量で、

$$f_i = \left( 1 + \frac{h_i}{3\rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial h_i} \right)^{-1} \quad (30)$$

と定義される。

系の熱力学的状態はエントロピー  $A_i$  を独立変数として記述される。断熱過程の場合、エントロピーは衝撃波以外のところでは流れに沿って一定である。Springel [2005, MNRAS, 364, 1105] では、衝撃波でのエントロピー増加と速度の変化を人工粘性を使って次のようにモデル化している:

$$\frac{dA_i}{dt} = \frac{1}{2} \frac{\gamma - 1}{\rho_i^{\gamma-1}} \sum_{j=1}^N m_j \Pi_{ij} \mathbf{m}v_{ij} \cdot \nabla_i \bar{W}_{ij} \quad (31)$$

$$\frac{d\mathbf{m}v_i}{dt} \Big|_{\text{visc}} = - \sum_{j=1}^N m_j \Pi_{ij} \nabla_i \bar{W}_{ij} \quad (32)$$

ここで、 $\mathbf{m}v_{ij} = \mathbf{m}v_i - \mathbf{m}v_j$ 、 $\mathbf{m}v_i$  は速度、 $\bar{W}_{ij} = \frac{1}{2}(W(r_{ij}, h_i) + W(r_{ij}, h_j))$  である。 $\Pi_{ij}$  に関しては、原論文を参照して頂きたい。

したがって、SPH 計算の手順は次のようになる:

(1) 式 (28) と以下の式を無矛盾に解き、密度  $\rho_i$  と  $h_i$  を決定する。

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W(r_{ij}, h_i) \quad (33)$$

(2) 式 (30) で定義される  $\nabla h$  term を計算する。

(3) 式 (29)、(31)、(32) の右辺を計算する。

(4) SPH 粒子の位置、速度、エントロピーを時間積分する。

以下、まずユーザ定義クラスと相互作用関数の実装について解説を行い、次にメインルーチンの実装について解説を行う。複数粒子種の取扱いは後者で解説する。

<sup>注 3)</sup>拘束条件に使用していることから、定数扱いであることに注意。

### 7.1.3 ユーザー定義型

本サンプルコードのユーザ定義型はすべて `user_defined.hpp` に定義されている。はじめに用意されているユーザ定義型の種類について簡単に説明しておく。冒頭で述べたように、本サンプルコードは 2 種類の粒子 ( $N$  体粒子, SPH 粒子) を扱う。そのため、`FullParticle` 型も 2 種類用意している ( $N$  体粒子用に `FP_nbody` クラスを, SPH 粒子用に `FP_sph` クラス)。相互作用は重力相互作用と流体相互作用の 2 種類ある。そのため、`Force` 型を 3 種類用意している (重力計算用に `Force_grav` クラスを、密度計算用に `Force_dens` クラスを、そして、圧力勾配による加速度 (以下、単に圧力勾配加速度) の計算用に `Force_hydro` クラスを; 第 4 節も参照のこと)。本サンプルコードでは、簡単のため、`EssentialParticleI` 型と `EssentialParticleJ` 型を 1 つのクラスで兼ねることにし (以下、単に `EssentialParticle` 型)、密度計算と圧力勾配加速度計算に同じ `EssentialParticle` 型を使用する。したがって、`EssentialParticle` 型の種類は 2 種類となっている (重力計算用に `EP_grav` クラスを、SPH 計算用に `EP_hydro` クラス)。

以下、各ユーザ定義型の実装について説明する。

### 7.1.3.1 FullParticle 型

まず、 $N$  体粒子用の FullParticle 型である FP\_nbody クラスについて解説する。このクラスには、 $N$  体粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 87 に、このクラスの実装を示す。メンバ変数 およびメンバ関数 の構成は、第 3-4 節で紹介した  $N$  体計算サンプルコードとほぼ同じであり、詳細はそちらを参照されたい。

Listing 87: FullParticle 型 (FP\_nbody クラス)

```
1 class FP_nbody{
2 public:
3     PS::S64      id;
4     PS::F64      mass;
5     PS::F64vec   pos;
6     PS::F64vec   vel;
7     PS::F64vec   acc;
8     PS::F64      pot;
9
10    PS::F64vec  getPos() const {
11        return pos;
12    }
13    PS::F64  getCharge() const {
14        return mass;
15    }
16    void setPos(const PS::F64vec& pos){
17        this->pos = pos;
18    }
19    void copyFromForce(const Force_grav & f) {
20        this->acc = f.acc;
21        this->pot = f.pot;
22    }
23    void writeAscii(FILE* fp) const {
24        fprintf(fp, "%lld\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\n",
25                this->id, this->mass,
```

```

26         this->pos.x, this->pos.y, this->pos.z,
27         this->vel.x, this->vel.y, this->vel.z);
28     }
29     void readAscii(FILE* fp) {
30         fscanf(fp, "%lld\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
31                 &this->id, &this->mass,
32                 &this->pos.x, &this->pos.y, &this->pos.z,
33                 &this->vel.x, &this->vel.y, &this->vel.z);
34     }
35 };

```

次に、SPH 粒子用の FullParticle 型である FP\_sph クラスについて解説する。このクラスには、SPH 粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 88 に、このクラスの実装を示す。メンバ変数の内、主要な変数の意味は次の通りである: id (識別番号)、mass (質量)、pos (位置 [ $\mathbf{m}r_i$ ])、vel (速度 [ $\mathbf{m}v_i$ ])、acc\_grav (重力加速度)、pot\_grav (重力ポテンシャル)、acc\_hydro (圧力勾配加速度)、dens (密度 [ $\rho_i$ ])、eng (単位質量あたりの内部エネルギー [ $u_i$ ])、ent (エントロピー関数 [以下、単にエントロピー] $[A_i]$ )、pres (圧力 [ $P_i$ ])、smth (smoothing length<sup>注 4)</sup> [ $h_i$ ])、gradh ( $\nabla h$  term [ $f_i$ ])、divv ( $(\nabla \cdot \mathbf{m}v)_i$ 、ここで下付きの  $i$  は粒子  $i$  の位置での微分を示している)、rotv ( $(\nabla \times \mathbf{m}v)_i$ )、BalsW (Balsara switch のための係数で、定義式は Balsara [1995, JCP, 121, 357] の  $f(a)$ )、snds (音速)、eng\_dot (eng の時間変化率)、ent\_dot (ent の時間変化率)、dt (この粒子の軌道を時間積分するときに許される最大の時間刻み幅)。

メンバ関数の構成は第 3-4 節で紹介した SPH サンプルコードと似ているが、以下の相違点がある:

- SPH 粒子が関わる相互作用計算は、重力計算、密度計算、圧力勾配加速度計算の 3 種類があるので、それに応じて copyFromForce も 3 つ用意されている。
- メンバ関数 writeBinaryPos の存在。この関数は、本サンプルコードのガラス状分布の SPH データを取得するためのモードで使用される (詳細は後述)。
- メンバ関数 setEntropy の存在。この関数はエントロピーの初期値を設定するのに使用される。

他のメンバ関数については、第 3-4 節を参照されたい。マクロについては、後ほど、まとめて解説する。

Listing 88: FullParticle 型 (FP\_sph クラス)

```

1 class FP_sph {
2 public:
3     PS::S64      id;
4     PS::F64      mass;
5     PS::F64vec   pos;
6     PS::F64vec   vel;
7     PS::F64vec   acc_grav; // gravitational acceleration
8     PS::F64      pot_grav; // gravitational potential
9     PS::F64vec   acc_hydro; // acceleration due to pressure-gradient
10    PS::S32      flag;

```

<sup>注 4)</sup> カーネル関数が 0 になる距離と定義。

```

11     PS::F64      dens; // mass density
12     PS::F64      eng; // specific internal energy
13     PS::F64      ent; // entropy
14     PS::F64      pres; // pressure
15     PS::F64      smth; // smoothing length
16     PS::F64      gradh; // grad-h term
17     PS::F64      divv; // divergence of velocity
18     PS::F64vec rotv; // rotation of velocity
19     PS::F64      BalsW; // Balsara switch
20     PS::F64      snds; // sound speed
21     PS::F64      eng_dot; // time rate of change of 'eng'
22     PS::F64      ent_dot; // time rate of change of 'ent'
23     PS::F64      dt; // hydrodynamic time step for this particle
24     PS::F64vec vel_half;
25     PS::F64      eng_half;
26     PS::F64      ent_half;
27
28     void copyFromForce(const Force_grav& f) {
29         this->acc_grav = f.acc;
30         this->pot_grav = f.pot;
31     }
32     void copyFromForce(const Force_dens& f){
33         this->flag    = f.flag;
34         this->dens   = f.dens;
35         this->smth   = f.smth;
36         this->gradh  = f.gradh;
37         this->divv   = f.divv;
38         this->rotv   = f.rotv;
39     }
40     void copyFromForce(const Force_hydro& f){
41         this->acc_hydro = f.acc;
42         this->eng_dot   = f.eng_dot;
43         this->ent_dot   = f.ent_dot;
44         this->dt        = f.dt;
45     }
46     PS::F64 getCharge() const{
47         return this->mass;
48     }
49     PS::F64vec getPos() const{
50         return this->pos;
51     }
52     PS::F64 getRSearch() const{
53         return this->smth;
54     }
55     void setPos(const PS::F64vec& pos){
56         this->pos = pos;
57     }
58     void writeAscii(FILE* fp) const{
59         fprintf(fp,
60                 "%lld\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t"
61                 "%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
62                 this->id, this->mass,
63                 this->pos.x, this->pos.y, this->pos.z,
64                 this->vel.x, this->vel.y, this->vel.z,
65

```

```

66             this->dens, this->eng, this->ent, this->pres);
67     }
68     void readAscii(FILE* fp){
69         fscanf(fp,
70                 "%lld\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t"
71                 "%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
72                 &this->id, &this->mass,
73                 &this->pos.x, &this->pos.y, &this->pos.z,
74                 &this->vel.x, &this->vel.y, &this->vel.z,
75                 &this->dens, &this->eng, &this->ent, &this->pres);
76     }
77     void writeBinaryPos(FILE* fp) const {
78         fwrite(&this->pos, sizeof(this->pos), 1, fp);
79     }
80     void setEntropy(){
81         ent = (specific_heat_ratio - 1.0) * eng / std::pow(dens,
82                                         specific_heat_ratio - 1.0);
83     }
84 #if defined(ISOTHERMAL_EOS)
85     // In this case, eng = const.
86     pres = (specific_heat_ratio - 1.0) * dens * eng;
87     ent = pres / std::pow(dens, specific_heat_ratio);
88 #else
89 #if defined(USE_ENTROPY)
90     pres = ent * std::pow(dens, specific_heat_ratio);
91     eng = pres / ((specific_heat_ratio - 1.0) * dens);
92 #else
93     pres = (specific_heat_ratio - 1.0) * dens * eng;
94     ent = pres / std::pow(dens, specific_heat_ratio);
95 #endif
96 #endif
97     snds = std::sqrt(specific_heat_ratio * pres / dens);
98 #if defined(USE_BALSARA_SWITCH)
99     BalsW = std::fabs(divv) / (std::fabs(divv) + std::sqrt(rotv * rotv
100                                ) + 1.0e-4 * snds / smth);
101 #else
102     BalsW = 1.0;
103 #endif
104 };

```

### 7.1.3.2 EssentialParticle 型

まず、重力計算用の EssentialParticle 型である EP\_grav クラスについて解説する。このクラスには、重力計算を行う際、 $i$  粒子と  $j$  粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持たせている。Listing 89 に、このクラスの実装を示す。EssentialParticle 型は FullParticle 型から値をコピーするのに必要なメンバ関数 copyFromFP() を持つ必要があるが、本サンプルコードでは粒子種が 2 種類のため、2 つの copyFromFP を実装する必要があることに注意されたい。

Listing 89: EssentialParticle 型 (EP\_grav クラス)

---

```

1 class EP_grav {
2 public:
3     PS::S64 id;
4     PS::F64 mass;
5     PS::F64vec pos;
6
7     void copyFromFP(const FP_nbody& fp) {
8         this->id    = fp.id;
9         this->mass = fp.mass;
10        this->pos   = fp.pos;
11    }
12    void copyFromFP(const FP_sph& fp) {
13        this->id    = fp.id;
14        this->mass = fp.mass;
15        this->pos   = fp.pos;
16    }
17    PS::F64 getCharge() const {
18        return this->mass;
19    }
20    PS::F64vec getPos() const {
21        return this->pos;
22    }
23 };

```

---

次に、密度計算と圧力勾配加速度計算用の EssentialParticle 型である EP\_hydro クラスについて解説する。このクラスには、密度計算と圧力勾配加速度計算を行う際、 $i$  粒子と  $j$  粒子が持つべき全ての物理量をメンバ変数として持たせている。Listing 90 に、このクラスの実装を示す。ここで、メンバ関数 getRSearch の定義が、単に smth を返すのではなく、係数 SCF\_smth(1 より大きいが 1 に近い値) を掛けて返している。これは、効率的に密度計算を行うための仕掛けで、後ほど解説を行う。

Listing 90: EssentialParticle 型 (EP\_hydro クラス)

---

```

1 class EP_hydro {
2 public:
3     PS::S64      id;
4     PS::F64vec   pos;
5     PS::F64vec   vel;
6     PS::F64      mass;
7     PS::F64      smth;
8     PS::F64      dens;
9     PS::F64      pres;
10    PS::F64     gradh;
11    PS::F64     snds;
12    PS::F64     BalSW;
13
14    void copyFromFP(const FP_sph& fp){
15        this->id    = fp.id;
16        this->pos   = fp.pos;
17        this->vel   = fp.vel;
18        this->mass  = fp.mass;
19        this->smth  = fp.smth;
20        this->dens  = fp.dens;

```

---

```

21     this->pres = fp.pres;
22     this->gradh = fp.gradh;
23     this->snds = fp.snds;
24     this->BalSW = fp.BalSW;
25 }
26 PS::F64vec getPos() const{
27     return this->pos;
28 }
29 PS::F64 getRSearch() const{
30     return SCF_smth * this->smth;
31 }
32 void setPos(const PS::F64vec& pos){
33     this->pos = pos;
34 }
35 };

```

---

### 7.1.3.3 Force型

まず、重力計算用の Force 型である Force\_grav クラスについて解説する。このクラスは、重力計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 91 にこのクラスの実装を示す。

Listing 91: Force 型 (Force\_grav クラス)

```

1 class Force_grav {
2 public:
3     PS::F64vec acc;
4     PS::F64 pot;
5     void clear() {
6         acc = 0.0;
7         pot = 0.0;
8     }
9 };

```

---

次に、密度計算用の Force 型である Force\_dens クラスについて解説する。このクラスは、密度計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 92 に、このクラスの実装を示す。本サンプルコードの SPH 法では、smoothing length は固定ではなく、密度に応じて変化する。そのため、メンバ変数として smth を持つ。また、密度計算と同時に、 $\nabla h$  term および  $(\nabla \cdot \mathbf{m}v)_i$ 、 $(\nabla \times \mathbf{m}v)_i$  の計算を同時に行うため、メンバ変数に gradh, divv, rotv を持つ。メンバ変数 flag は  $\rho_i$  と  $h_i$  を決定するイテレーション計算が収束したかどうかの結果を格納する変数である（詳細は、相互作用関数の節を参照のこと）。

Listing 92: Force 型 (Force\_dens クラス)

```

1 class Force_dens{
2 public:
3     PS::S32 flag;
4     PS::F64 dens;
5     PS::F64 smth;
6     PS::F64 gradh;

```

---

```

7   PS::F64 divv;
8   PS::F64vec rotv;
9   void clear(){
10      flag = 0;
11      dens = 0.0;
12      gradh = 0.0;
13      divv = 0.0;
14      rotv = 0.0;
15   }
16 };

```

---

最後に、圧力勾配加速度計算用の Force 型である Force\_hydro クラスについて解説する。このクラスは、圧力勾配加速度計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 93 に、このクラスの実装を示す。

Listing 93: Force 型 (Force\_hydro クラス)

---

```

1 class Force_hydro{
2 public:
3     PS::F64vec acc;
4     PS::F64 eng_dot;
5     PS::F64 ent_dot;
6     PS::F64 dt;
7     void clear(){
8         acc = 0.0;
9         eng_dot = 0.0;
10        ent_dot = 0.0;
11    }
12 };

```

---

#### 7.1.4 相互作用関数

本サンプルコードで使用する相互作用関数はすべて user\_defined.hpp に実装されている。全部で 4 種類あり、重力計算(粒子間相互作用及び粒子-超粒子間相互作用)、密度計算、圧力勾配加速度計算に使用される。以下、順に説明していく。

##### 7.1.4.1 重力計算

重力計算用の相互作用関数は 関数テンプレート CalcGravity として実装されている。Listing 94 にこれらの実装を示す。実装は第 3-4 節で紹介した N 体計算サンプルコードのものとほぼ同じであり、詳細はそちらを参照されたい。

Listing 94: 相互作用関数 (重力計算用)

---

```

1 #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
2 template <class TParticleJ>
3 void CalcGravity(const EP_grav * iptcl,
4                  const PS::S32 ni,
5                  const TParticleJ * jptcl,
6                  const PS::S32 nj,
7                  Force_grav * force) {

```

```

8   const PS::S32 nipipe = ni;
9   const PS::S32 njpipe = nj;
10  PS::F64 (*xi)[3] = (PS::F64 (*)[3])malloc(sizeof(PS::F64) * nipipe *
11    PS::DIMENSION);
12  PS::F64 (*ai)[3] = (PS::F64 (*)[3])malloc(sizeof(PS::F64) * nipipe *
13    PS::DIMENSION);
14  PS::F64 *pi      = (PS::F64 *)malloc(sizeof(PS::F64) * nipipe);
15  PS::F64 (*xj)[3] = (PS::F64 (*)[3])malloc(sizeof(PS::F64) * njpipe *
16    PS::DIMENSION);
17  PS::F64 *mj      = (PS::F64 *)malloc(sizeof(PS::F64) * njpipe);
18  for(PS::S32 i = 0; i < ni; i++) {
19    xi[i][0] = iptcl[i].getPos()[0];
20    xi[i][1] = iptcl[i].getPos()[1];
21    xi[i][2] = iptcl[i].getPos()[2];
22    ai[i][0] = 0.0;
23    ai[i][1] = 0.0;
24    ai[i][2] = 0.0;
25    pi[i]   = 0.0;
26  }
27  for(PS::S32 j = 0; j < nj; j++) {
28    xj[j][0] = jptcl[j].getPos()[0];
29    xj[j][1] = jptcl[j].getPos()[1];
30    xj[j][2] = jptcl[j].getPos()[2];
31    mj[j]   = jptcl[j].getCharge();
32  }
33  PS::S32 devid = PS::Comm::getThreadNum();
34  g5_set_xmjMC(devid, 0, nj, xj, mj);
35  g5_set_nMC(devid, nj);
36  g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, ni);
37  for(PS::S32 i = 0; i < ni; i++) {
38    force[i].acc[0] += ai[i][0];
39    force[i].acc[1] += ai[i][1];
40    force[i].acc[2] += ai[i][2];
41    force[i].pot   -= pi[i];
42  }
43  free(xi);
44  free(ai);
45  free(pi);
46  free(xj);
47  free(mj);
48 } #else
49 template <class TParticleJ>
50 void CalcGravity (const EP_grav * ep_i,
51                   const PS::S32 n_ip,
52                   const TParticleJ * ep_j,
53                   const PS::S32 n_jp,
54                   Force_grav * force) {
55   const PS::F64 eps2 = eps_grav * eps_grav;
56   for(PS::S32 i = 0; i < n_ip; i++){
57     PS::F64vec xi = ep_i[i].getPos();
58     PS::F64vec ai = 0.0;
59     PS::F64 poti = 0.0;
60     for(PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++){
61       PS::F64vec rij = xi - ep_j[j].getPos();
62       PS::F64 dist = rij.length();
63       if(dist > 0.0)
64         force[i].pot += poti * (1.0 / dist);
65     }
66   }
67 }
```

```

60         PS::F64     r3_inv = rij * rij + eps2;
61         PS::F64     r_inv   = 1.0/sqrt(r3_inv);
62         r3_inv = r_inv * r_inv;
63         r_inv *= ep_j[j].getCharge();
64         r3_inv *= r_inv;
65         ai      -= r3_inv * rij;
66         poti   -= r_inv;
67     }
68     force[i].acc += ai;
69     force[i].pot += poti;
70 }
71 }
72 #endif

```

### 7.1.4.2 密度計算

密度計算用の相互作用関数は 関数オブジェクト `CalcDensity` として実装されている。Listing 95 に、実装を示す。実装はマクロ `ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH` が定義されているか否かで分かれる。このマクロが未定義の場合には、固定長カーネルコードとなり、実装は第 3-4 節で紹介した SPH サンプルコードとほぼ同じであるので、そちらを参照されたい。以下、このマクロが定義されている場合の実装について解説する。

第 7.1.2 節で説明したように、密度  $\rho_i$  と smoothing length  $h_i$  は式 (33) と式 (28) を無矛盾に解いて決定する必要がある。これには 2 つの方程式を反復的に解く必要がある。このイテレーションを無限 for ループの中で行っている。本サンプルコードでは  $\rho_i$  と  $h_i$  の計算を効率的に行うため、smoothing length の値を定数 `SCF_smth` 倍してから密度計算を実行している (`EP_hydro` クラスのメンバ関数 `getRSearch` の実装を参照のこと)。このため、定数倍する前の smoothing length の値を  $h_{i,0}$  とすると、このイテレーションの間に  $h_i$  を 0 から  $h_{\max,\text{alw}} \equiv \text{scf\_smth} \times h_{i,0}$  までの間なら変化させてもよいことになる。なぜなら、 $j$  粒子リストの取りこぼしは発生しないからである。逆にこの範囲でイテレーションが収束しなければ、求めたい  $h_i$  は  $h_{\max,\text{alw}}$  よりも大きいということになり、既存の  $j$  粒子リストでは  $\rho_i$  と  $h_i$  を決定できないということになる。この場合、 $h_{i,0}$  を大きくした上で、密度計算をやり直す必要がある。この外側のイテレーションは `main.cpp` の `void` 関数 `calcDensity`(関数名の先頭が小文字であることに注意) で行われている。この `void` 関数の詳細は第 7.1.5 節で行う。

無限 for ループの後には、 $\nabla h$  term の計算、 $(\nabla \cdot \mathbf{mv})_i$  及び  $(\nabla \times \mathbf{mv})_i$  の計算を行っている。

Listing 95: 相互作用関数 (密度計算用)

```

1 class CalcDensity{
2 public:
3     void operator () (const EP_hydro * ep_i,
4                         const PS::S32 n_ip,
5                         const EP_hydro * ep_j,
6                         const PS::S32 n_jp,
7                         Force_dens * force){
8 #if defined(ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH)
9     const PS::F64 eps = 1.0e-6;
10    const PS::F64 M_trgt = mass_avg * N_neighbor;
11    for (PS::S32 i = 0; i < n_ip; i++) {

```

```

12     PS::F64 dens = 0.0;
13     PS::F64 h = ep_i[i].smth;
14     const PS::F64 h_max_alw = SCF_smth * h; // maximum allowance
15     PS::F64 h_L = 0.0;
16     PS::F64 h_U = h_max_alw;
17     PS::F64 dh_prev = 0.0;
18     PS::S32 n_unchanged = 0;
19     // Software caches
20     PS::F64 * mj = (PS::F64 *)malloc(sizeof(PS::F64) * n_jp);
21     PS::F64 * rij = (PS::F64 *)malloc(sizeof(PS::F64) * n_jp);
22     for (PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++) {
23         mj[j] = ep_j[j].mass;
24         const PS::F64vec dr = ep_j[j].pos - ep_i[i].pos;
25         rij[j] = std::sqrt(dr * dr);
26     }
27     for (;;) {
28         // Calculate density
29         dens = 0.0;
30         for (PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++) {
31             dens += mj[j] * W(rij[j], h);
32         }
33         // Check if the current value of the smoohting length
34         // satisfies
35         // Eq.(5) in Springel (2005).
36         const PS::F64 M = 4.0 * math_const::pi * h * h * h * dens
37             / 3.0;
38         if ((h < h_max_alw) && (std::abs(M/M_trgt - 1.0) < eps)) {
39             // In this case, Eq.(5) holds within a specified
40             // accuracy.
41             force[i].flag = 1;
42             force[i].dens = dens;
43             force[i].smth = h;
44             break;
45         }
46         if (((h == h_max_alw) && (M < M_trgt)) || (n_unchanged ==
47             4)) {
48             // In this case, we skip this particle forcibly.
49             // In order to determine consistently the density
50             // and the smoohting length for this particle,
51             // we must re-perform calcForceAllAndWriteBack().
52             force[i].flag = 0;
53             force[i].dens = dens;
54             force[i].smth = h_max_alw;
55             break;
56         }
57         // Update h_L & h_U
58         if (M < M_trgt) {
59             if (h_L < h) h_L = h;
60         }
61         else if (M_trgt < M) {
62             if (h < h_U) h_U = h;
63         }
64         const PS::F64 dh = h_U - h_L;
65         if (dh == dh_prev) {
66             n_unchanged++;
67         }
68     }
69 
```

```

63
64     }
65     else {
66         dh_prev = dh;
67         n_unchanged = 0;
68     }
69     // Update smoothing length
70     h = std::pow((3.0 * M_trgt)/(4.0 * math_const::pi * dens),
71                   1.0/3.0);
72     if ((h <= h_L) || (h == h_U)) {
73         // In this case, we switch to the bisection search.
74         // The inclusion of '=' in the if statement is very
75         // important to escape a limit cycle.
76         h = 0.5 * (h_L + h_U);
77     }
78     else if (h_U < h) {
79         h = h_U;
80     }
81     // Calculate grad-h term
82     if (force[i].flag == 1) {
83         PS::F64 drho_dh = 0.0;
84         for (PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++) {
85             drho_dh += mj[j] * dWdh(rij[j], h);
86         }
87         force[i].gradh = 1.0 / (1.0 + (h * drho_dh) / (3.0 * dens)
88                               );
89     }
90     else {
91         force[i].gradh = 1.0; // dummy value
92     }
93 #if defined(USE_BALSARA_SWITCH)
94     // Compute \div v & \rot v for Balsara switch
95     for (PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++) {
96         const PS::F64vec dr = ep_i[i].pos - ep_j[j].pos;
97         const PS::F64vec dv = ep_i[i].vel - ep_j[j].vel;
98         force[i].divv -= mj[j] * dv * gradW(dr, force[i].smth);
99         force[i].rotv -= mj[j] * dv ^ gradW(dr, force[i].smth);
100    }
101   force[i].divv /= force[i].dens;
102   force[i].rotv /= force[i].dens;
103
104 }
105
106 #else
107     for (PS::S32 i = 0; i < n_ip ; i++){
108         // Compute density
109         for (PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++){
110             const PS::F64vec dr = ep_j[j].pos - ep_i[i].pos;
111             const PS::F64 rij = std::sqrt(dr * dr);
112             force[i].dens += ep_j[j].mass * W(rij, ep_i[i].smth);
113         }
114         force[i].smth = ep_i[i].smth;
115         force[i].gradh = 1.0;

```

```

116 #if defined(USE_BALSARA_SWITCH)
117     // Compute \div v & \rot v for Balsara switch
118     for (PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++) {
119         const PS::F64vec dr = ep_i[i].pos - ep_j[j].pos;
120         const PS::F64vec dv = ep_i[i].vel - ep_j[j].vel;
121         force[i].divv -= ep_j[j].mass * dv * gradW(dr, force[i].
122             smth);
123         force[i].rotv -= ep_j[j].mass * dv ^ gradW(dr, force[i].
124             smth);
125     }
126     force[i].divv /= force[i].dens;
127     force[i].rotv /= force[i].dens;
128 #endif
129 }
130 };

```

---

### 7.1.4.3 圧力勾配加速度計算

圧力勾配加速度用の相互作用関数は 関数オブジェクト `CalcHydroForce` として実装されている。Listing 96 に、実装を示す。この `void` 関数では、式 (29)、(31)、(32) の右辺の計算、及び、Springel [2005, MNRAS, 364, 1105] の式 (16) に従って `dt` の計算を行っている (`dt` については `FP_sph` クラス の説明を参照のこと)。

Listing 96: 相互作用関数 (圧力勾配加速度計算用)

```

1 class CalcHydroForce{
2 public:
3     void operator () (const EP_hydro * ep_i,
4                         const PS::S32 n_ip,
5                         const EP_hydro * ep_j,
6                         const PS::S32 n_jp,
7                         Force_hydro * force){
8         for (PS::S32 i = 0; i < n_ip; i++){
9             const PS::F64vec pos_i = ep_i[i].pos;
10            const PS::F64vec vel_i = ep_i[i].vel;
11            const PS::F64 smth_i = ep_i[i].smth;
12            const PS::F64 dens_i = ep_i[i].dens;
13            const PS::F64 pres_i = ep_i[i].pres;
14            const PS::F64 f_i = ep_i[i].gradh;
15            const PS::F64 snds_i = ep_i[i].snds;
16            const PS::F64 povrho2_i = pres_i / (dens_i * dens_i);
17            PS::F64 v_sig_max = 0.0;
18            for (PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++){
19                const PS::F64vec dr = pos_i - ep_j[j].pos;
20                const PS::F64vec dv = vel_i - ep_j[j].vel;
21                const PS::F64 w_ij = (dv * dr < 0) ? dv * dr / std::sqrt(dr
22                    * dr) : 0;
23                const PS::F64 v_sig = snds_i + ep_j[j].snds - 3.0 * w_ij;
24                v_sig_max = std::max(v_sig_max, v_sig);
25                const PS::F64 AV = - 0.5 * alpha_AV * v_sig * w_ij / (0.5 *
26                    (dens_i + ep_j[j].dens))

```

```

25           * 0.5 * (ep_i[i].BalSW + ep_j[j].BalSW);
26   const PS::F64vec gradW_i = gradW(dr, smth_i);
27   const PS::F64vec gradW_j = gradW(dr, ep_j[j].smth);
28   const PS::F64vec gradW_ij = 0.5 * (gradW_i + gradW_j);
29   const PS::F64 povrho2_j = ep_j[j].pres / (ep_j[j].dens *
30           ep_j[j].dens);
31   const PS::F64 f_j = ep_j[j].gradh;
32   force[i].acc -= ep_j[j].mass * (f_i * povrho2_i *
33           gradW_i
34           + f_j * povrho2_j *
35           gradW_j
36           + AV * gradW_ij);
37   force[i].eng_dot += ep_j[j].mass * (f_i * povrho2_i *
38           gradW_i
39           + 0.5 * AV * gradW_ij) *
40           dv;
41   force[i].ent_dot += 0.5 * ep_j[j].mass * AV * gradW_ij * dv;
42 }
43 }

```

---

### 7.1.5 プログラム本体

本節では、主に `main.cpp` に実装されたサンプルコード本体について解説を行う。詳細な説明に入る前に、サンプルコードの内容と全体構造について説明を与える。[7.1 節](#)冒頭で述べたように、このサンプルコードでは円盤銀河の  $N$  体/SPH シミュレーションを行うものであるが、初期条件としては円盤銀河の他、簡単なテスト計算用の初期条件も用意されている。具体的に以下の 4 つの場合に対応している：

- (a) 円盤銀河用の初期条件。この初期条件はコンパイルオプション時に-DINITIAL\_CONDITION=0 が指定された場合に選択される。初期条件作成は `ic.hpp` の `void` 関数 `galaxy_IC` で行われる。ダークマターと星の分布は事前に MAGI で作成されたファイルを読み込んで設定される。一方、ガスの初期分布はこの `void` 関数内部で生成される。デフォルトでは粒子数  $2^{18}$  で exponential disk ( $M = 10^{10} M_{\odot}$ ,  $R_s = 7 \text{ kpc}$  [scale radius],  $R_t = 12.5 \text{ kpc}$  [truncation radius],  $z_d = 0.4 \text{ kpc}$  [scale height],  $z_t = 1 \text{ kpc}$  [truncation height]) が生成される。
- (b) Cold collapse 問題用の初期条件。この初期条件はコンパイルオプション時に-DINITIAL\_CONDITION=1 が指定された場合に選択される。初期条件作成は `ic.hpp` の `void` 関数 `cold-collapse-test_IC` で行われる。
- (c) Evrard test ([Evrard \[1988,MNRAS,235,911\]](#) の第 3.3 節) 用の初期条件。この初期条件はコンパイルオプション時に-DINITIAL\_CONDITION=2 が指定された場合に選択される。初期条件作成は `ic.hpp` の `void` 関数 `Evrard-test_IC` で行われる。作成方法は 2 つあり、`void` 関数の最後の引数の値を手動で 0 か 1 にして指定する。0 の場合、格子状に

並んだ SPH 粒子から Evrard 球の密度分布を作成する。1 の場合、ガラス状に分布した SPH 粒子から Evrard 球の密度分布を作成する。1 を選択するためには、事前に次項で説明するモードで SPH 粒子のデータを作成しておく必要がある。

- (d)  $[-1, 1]^3$  の立方体中に一様密度のガラス状の SPH 粒子分布を作成するための初期条件/動作モード。この初期条件はコンパイルオプション時に-DINITIAL\_CONDITION=3 が指定された場合に選択される。初期条件作成は `ic.hpp` の `void` 関数 `make_glass_IC` で行われる。

コード全体の構造は以下のようになっている:

- (1) FDPS で使用するオブジェクトの生成と初期化
- (2) (必要であれば) Phantom-GRAPE ライブラリの初期化
- (3) 初期条件ファイルの読み込み、或いは、初期条件の作成
- (4) 終了時刻まで粒子の運動を計算

以下で、個々について詳しく説明を行う。

#### 7.1.5.1 ヘッダファイルのインクルード

FDPS の機能を使用するため `main.cpp` のファイル冒頭部分で、`particle_simulator.hpp` をインクルードしている。

Listing 97: FDPS のヘッダーファイルのインクルード

---

```
1 #include <particle_simulator.hpp>
```

---

#### 7.1.5.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メイン関数に記述する。

Listing 98: FDPS の開始

---

```
1 PS::Initialize(argc, argv);
```

---

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メイン関数の最後に次のように記述する。

Listing 99: FDPS の終了

---

```
1 PS::Finalize();
```

---

#### 7.1.5.3 オブジェクトの生成と初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

### 7.1.5.3.1 粒子群オブジェクトの生成と初期化

本サンプルコードでは、 $N$  体粒子と SPH 粒子のデータを異なる粒子群オブジェクトを用いて管理する。具体的には  $N$  体粒子のデータには `psys_nbody`、SPH 粒子のデータには `psys_sph` という粒子群オブジェクトを使う。コードではこれらの粒子群オブジェクトを生成し、`initialize` メソッドで初期化を行っている。

Listing 100: 粒子群オブジェクトの生成・初期化

---

```

1 PS::ParticleSystem<FP_nbody> psys_nbody;
2 PS::ParticleSystem<FP_sph> psys_sph;
3 psys_nbody.initialize();
4 psys_sph.initialize();
```

---

### 7.1.5.3.2 領域情報オブジェクトの生成と初期化

本サンプルコードでは、計算領域の分割を、 $N$  体粒子と SPH 粒子を合わせた粒子全体が等分割されるように行うこととする。この場合、必要な領域情報オブジェクトは 1 つである。したがって、本コードでは `dinfo` という領域情報オブジェクトを 1 つ生成し、`initialize` メソッドで初期化している。

Listing 101: 領域情報オブジェクトの生成・初期化

---

```

1 PS::DomainInfo dinfo;
2 dinfo.initialize();
```

---

### 7.1.5.3.3 ツリーオブジェクトの生成と初期化

本サンプルコードでは、重力計算用、密度計算、圧力勾配加速度計算のそれぞれに 1 つずつツリーを用意している。ツリーオブジェクトの初期化の際には、API `initialize` の第 1 引数に計算で使用する大雑把な粒子数を渡す必要がある。重力計算用のツリーオブジェクト `tree_grav` では、ローカル粒子数の 3 倍の値を渡している。一方、密度計算と圧力勾配加速度計算に使用されるツリーオブジェクト `tree_dens` では、ローカルの SPH 粒子数の 3 倍の値を渡している。

Listing 102: ツリーオブジェクトの生成・初期化

---

```

1 const PS::S64 numPtclSPH = std::max(psys_sph.getNumberOfParticleGlobal()
    ,1);
2 const PS::S64 numPtclAll = psys_nbody.getNumberOfParticleGlobal()
    + numPtclSPH;
4
5 const PS::F32 theta_grav = 0.5;
6 PS::TreeForForceLong<Force_grav, EP_grav, EP_grav>::Monopole tree_grav;
7 tree_grav.initialize(3 * numPtclAll, theta_grav);
8
9 PS::TreeForForceShort<Force_dens, EP_hydro, EP_hydro>::Gather tree_dens;
10 tree_dens.initialize(3 * numPtclSPH);
11
```

---

---

```
12 PS::TreeForForceShort<Force_hydro, EP_hydro, EP_hydro>::Symmetry
    tree_hydro;
13 tree_hydro.initialize(3 * numPtclSPH);
```

---

### 7.1.5.4 初期条件の設定

初期条件の設定は関数 `setupIC` で行われる。この `void` 関数はマクロ `INITIAL_CONDITION` の値に応じて、内部でさらに別の `void` 関数を呼び出しており、呼び出される `void` 関数とマクロの値の対応は、既に述べた通りである。引数の `time_dump`, `dt_dump`, `time_end` は、データ出力の最初の時刻、出力時間間隔、シミュレーション終了時間を表す変数であり、個々の初期条件作成関数の中で設定すべきものである。また、境界条件、重力ソフトニングの値 (`eps_grav`)、系に許される最大の時間刻み (`dt_max`) も設定する必要がある (`dt_max` に関しては必ずしも設定する必要はない)。

Listing 103: 初期条件の設定

---

```
1 setupIC(psyst_nbody, psyst_sph, dinfo, time_dump, dt_dump, time_end);
```

---

以下、円盤銀河の初期条件を設定する関数 `GalaxyIC` について、留意事項を述べておく。

- MAGI が作成する粒子データは MAGI のコード内単位系で出力される。単位系の情報は MAGI を実行したときに出力されるファイル `doc/unit.txt` に記述されている。このファイルに記載された単位質量、単位長さ、単位時間の値と、定数 `magi_unit_mass`, `magi_unit_leng`, `magi_unit_time` は一致させなければならない。
- 関数が読み込むファイルは `./magi_data/dat/Galaxy.tipsy` である。別なファイルを読み込ませたい場合、手動でソースコードを変更する必要がある。
- 関数が生成するガス分布は  $R (\equiv \sqrt{x^2 + y^2})$  方向と  $z$  方向に exponential な密度分布を持つガス円盤である。それぞれの方向のスケール長が変数 `Rs`, `zd` で、分布を打ち切る距離は変数 `Rt`, `zt` である。
- 初期のガスの熱力学的状態はガス温度 `temp` と水素原子に対する平均分子量 `mu` を与えて指定する。コンパイル時マクロ `USE_ENTROPY` が定義済み/未定義に関わらず、粒子の熱力学的状態は単位質量あたりの内部エネルギーとして与える必要がある (`fp_sph` のメンバ変数 `eng`)。`USE_ENTROPY` が定義済みの場合、メイン関数 `main()` で呼び出されている関数 `setEntropy` によって、計算された密度と内部エネルギーの初期値から初期エントロピーが自動的に決定される。未定義の場合、ここで設定した `eng` の値がそのまま内部エネルギーの初期値となる。

### 7.1.5.5 領域分割の実行

複数の粒子種がある場合に、これらを合わせた粒子分布に基づいて領域分割を実行するには、領域情報オブジェクト用の 2 つの API `collectSampleParticle` と `decomposeDomain`

を併用する必要がある。まず、API `collectSampleParticle` でそれぞれの粒子群オブジェクトからサンプル粒子を集める。このとき、2種類目以降の粒子種に対する呼び出しでは、第2引数に `false` を指定する必要がある。この指定がないと、1種類目の粒子群オブジェクトの情報がクリアされてしまうからである。すべての粒子群オブジェクトに対して、このAPIの呼び出しが終わったら、API `decomposeDomain` で領域分割を実行する。

Listing 104: 領域分割の実行

---

```

1 dinfo.collectSampleParticle(psys_nbody);
2 dinfo.collectSampleParticle(psys_sph, false);
3 dinfo.decomposeDomain();

```

---

### 7.1.5.6 粒子交換の実行

先程計算した領域情報に基いてプロセス間の粒子の情報を交換するには、粒子群オブジェクト用 API `exchangeParticle` を使用する:

Listing 105: 粒子交換の実行

---

```

1 psys_nbody.exchangeParticle(dinfo);
2 psys_sph.exchangeParticle(dinfo);

```

---

### 7.1.5.7 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が完了したら、計算開始時の加速度を決定するため、相互作用計算を行う必要がある。以下に、本サンプルコードにおける初期条件作成後最初の相互作用計算の実装を示す。最初に重力計算をし、その後、密度計算・圧力勾配加速度計算を行っている。

Listing 106: 相互作用計算の実行

---

```

1 // - Gravity calculations
2 #if defined(ENABLE_GRAVITY_INTERACT)
3     tree_grav.calcForceAllAndWriteBack(CalcGravity<EP_grav>,
4         CalcGravity<PS::SPJMonopole>, psys_nbody, psys_sph, dinfo);
5 #endif
6
7 // - SPH calculations
8 #if defined(ENABLE_HYDRO_INTERACT)
9     calcDensity(psys_sph, dinfo, tree_dens);
10 #if defined(USE_ENTROPY)
11     setEntropy(psys_sph);
12 #endif
13     setPressure(psys_sph);
14     tree_hydro.calcForceAllAndWriteBack(CalcHydroForce(), psys_sph, dinfo)
15     ;
#endif

```

---

まず重力計算の方法について説明する。重力計算は、 $N$  体粒子と SPH 粒子の両方が関わる。このような複数の粒子種の間で 1 つの相互作用計算を行うには、ツリーオブジェクト用

の API `TreeForForce::calcForceAllAndWriteBack` の引数に複数の粒子群オブジェクトを渡せばよい。

次に密度計算と圧力勾配加速度計算について説明する。これらの計算は1粒子種しか関わらないため、本チュートリアルでこれまで使ってきた API `calcForceAllAndWriteBack` が使用できる。圧力勾配加速度に関しては、メイン関数 `main` 内でこの API を直接呼び出している。一方、密度計算は、第 7.1.4 節でも述べた通り、 $\rho_i$  と  $h_i$  のイテレーション計算が収束しなかったときのための対処が必要であり、これを `void` 関数 `calcDensity` の内で行っている。実装は次のようにになっている。実装はマクロ `ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH` が定義済みか未定義かで分岐しており、未定義の場合には固定長カーネルの SPH コードとなるので、単に、API `calcForceAllAndWriteBack` を1回だけ実行している。一方、上記マクロが定義済みの場合、すべての粒子の  $\rho_i$  と  $h_i$  が無矛盾に決定されるまで、API `calcForceAllAndWriteBack` を繰り返し実行する。各粒子が収束したかの情報はクラス `fp_sph` のメンバ変数 `flag` に格納されており、値が 1 のときに収束していることを示す。`flag` が 1 を取る粒子数が全 SPH 粒子数に一致したときに計算を終わらせている。

Listing 107: 関数 `calcDensity` の実装

---

```

1 void calcDensity(PS::ParticleSystem<FP_sph> & psys,
2                   PS::DomainInfo & dinfo,
3                   PS::TreeForForceShort<Force_dens, EP_hydro, EP_hydro>::Gather & tree) {
4 #if defined(ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH)
5     const PS::S32 n_loc = psys.getNumberOfParticleLocal();
6     const PS::S64 n_glb = psys.getNumberOfParticleGlobal();
7     // Determine the density and the smoothing length so that Eq.(6) in
    // Springel (2005)
8     // holds within a specified accuracy.
9     SCF_smth = 1.25;
10    PS::S32 iter = 0;
11    for (;;) {
12        iter++;
13        if (PS::Comm::getRank() == 0) std::cout << "iter=" << iter <<
    std::endl;
14        // Compute density, etc.
15        tree.calcForceAllAndWriteBack(CalcDensity(), psys, dinfo);
16        // Check convergence
17        PS::S32 n_compl_loc = 0;
18        for (PS::S32 i = 0; i < n_loc; i++) {
19            if (psys[i].flag == 1) n_compl_loc++;
20        }
21        const PS::S64 n_compl = PS::Comm::getSum(n_compl_loc);
22        if (n_compl == n_glb) break;
23    }
24    // Reset SCF_smth
25    SCF_smth = 1.0;
26 #else
27    SCF_smth = 1.0;
28    tree.calcForceAllAndWriteBack(CalcDensity(), psys, dinfo);
29 #endif
30 }
```

---

`void` 関数 `setEntropy` は、初期条件作成後 1 回だけ呼び出される `void` 関数で、エントロピーの初期値をセットする。式 (27) から、エントロピーを計算するには初期密度が必要である。そのため、`void` 関数 `calcDensity` の後に配置されている。`void` 関数 `setEntropy` では、計算された密度と  $u_i$  の初期値を使って、エントロピーをセットする。これ以降は、エントロピーが独立変数となる。

#### 7.1.5.8 時間積分ループ

本サンプルコードでは、時間積分を Leapfrog 時間積分法によって行っている（この方法に関しては、第 4.1.3.4.4 節を参照されたい）。粒子位置を時間推進する  $D(\cdot)$  オペレータは `void` 関数 `full_drift`、粒子速度を時間推進する  $K(\cdot)$  オペレータは `void` 関数 `initial_kick`, `final_kick` として実装されている。

## 8 ユーザーサポート

FDPS を使用したコード開発に関する相談は [fdps-support<at>mail.jmlab.jp](mailto:fdps-support<at>mail.jmlab.jp) で受け付けています (<at>は@に変更お願い致します)。以下のような場合は各項目毎の対応をお願いします。

### 8.1 コンパイルできない場合

ユーザーには以下の情報提供をお願いします。

- コンパイル環境
- コンパイル時に出力されるエラーメッセージ
- ソースコード (可能ならば)

### 8.2 コードがうまく動かない場合

ユーザーには以下の情報提供をお願いします。

- 実行環境
- 実行時に出力されるエラーメッセージ
- ソースコード (可能ならば)

### 8.3 その他

思い通りの性能がでない場合やその他の相談なども、上のメールアドレスにお知らせください。

## 9 ライセンス

---

MIT ライセンスに準ずる。標準機能のみ使用する場合は、Iwasawa et al. (PASJ, 68, 54)、Namekata et al. (PASJ, 70, 70)、Iwasawa et al. (PASJ, 72, 13) の引用をお願いします。

拡張機能の Particle Mesh Multipole クラスを使用する場合は Nitadori(2014, arXiv:1409.5981) の引用をお願いします。

拡張機能の Particle Mesh クラスは GreeM コード (開発者: 石山智明、似鳥啓吾) (Ishiyama, Fukushige & Makino 2009, Publications of the Astronomical Society of Japan, 61, 1319; Ishiyama, Nitadori & Makino, 2012 SC'12 Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking Stroage and Analysis, No. 5) のモジュールを使用している。GreeM コードは Yoshikawa & Fukushige (2005, Publications of the Astronomical Society of Japan, 57, 849) で書かれたコードをベースとしている。Particle Mesh クラスを使用している場合は、上記 3 つの文献の引用をお願いします。

拡張機能のうち x86 版 Phantom-GRAPE を使用する場合は Tanikawa et al.(2012, New Astronomy, 17, 82) と Tanikawa et al.(2012, New Astronomy, 19, 74) の引用をお願いします。

Copyright (c) <2015-> <FDPS development team>

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the “Software”), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED “AS IS”, WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.